



Proyecto de Innovación y Mejora de la Calidad Docente

Convocatoria 2014

Nº de proyecto: 103

“Innovación docente para sentar las bases docentes de la competición  
Chem-E-Car en España”

Investigador responsable: Carlos Negro Álvarez

Miembros del equipo investigador: J. Tijero Miquel , A. Blanco Suárez, E. de la Fuente González, M.C. Monte Lara, A. Tijero Cruz, D. Hermosilla Redondo, I. Latour Romero, N. Merayo Cuevas, L. Cortijo Garrido, H. Barndok, P. López Expósito, L. Blanco Jaén, A. Balea Martín, J. Plaza Rodríguez, F. García-Ochoa, M. Ladero Galán, M.I. Guijarro Gil, J. Esteban Serrano, M. Ravelo Velasquez, V. Ripoll Morales, A. Rodríguez Martin, M. Wojtusik, S. de La Morena López, F. J. Pérez Trujillo, M.S. Mato Díaz, G. Alcalá Penadés, H. Santos Barahona, M.I. Lasanta Carrasco, T. de Miguel Gamo, G. García Martín

Facultad de Ciencias Químicas

Departamento de Ingeniería Química

## **1. Objetivos propuestos en la presentación del proyecto (Máximo 2 folios)**

El objetivo principal de este proyecto es la elaboración de una serie de herramientas docentes encaminadas a conseguir que el alumno adquiriera la capacidad de realizar y controlar de forma segura una reacción química, concibiendo, diseñando y ejecutando un sistema para llevar a cabo dicha reacción y controlarla cumpliendo una serie de estándares de seguridad y medioambientales. Para alcanzar este objetivo se han establecido los siguientes objetivos específicos:

**Objetivo 1:** Elaboración de una base de datos de diferentes reacciones químicas. Con la consecución de dicho objetivo se pretende mejorar la formación del alumno en el conocimiento de las reacciones químicas.

**Objetivo 2:** Elaboración del material docente necesario para guiar el aprendizaje autodidacta del alumno en la organización y realización de los diferentes cálculos que debe realizar para diseñar el prototipo en el que se lleve a cabo una reacción química de forma técnica y económicamente viable, ajustándose a un presupuesto.

**Objetivo 3:** Diseño de una prueba de evaluación y elaboración de una guía metodológica con el objetivo de que los alumnos puedan identificar, analizar, valorar y controlar los distintos riesgos presentes en una reacción química, con el fin de establecer las medidas preventivas a adoptar para la eliminación y reducción de dichos riesgos. Con la consecución de dicho objetivo se pretende mejorar la formación del alumno en seguridad en los entornos industriales y de laboratorio.

**Objetivo 4:** Elaboración de material docente que guíe al alumno en la selección de los materiales de construcción más adecuados para cada parte del prototipo en el que se lleva a cabo la reacción.

**Objetivo 5:** Elaborar un compendio de requisitos medioambientales que debe cumplir el prototipo diseñado, así como una lista de comprobación, para que el alumno pueda tenerlos en cuenta desde el comienzo del diseño. Con la consecución de este objetivo se logra que el alumno aprenda a integrar los aspectos medioambientales en cualquier proyecto desde las fases iniciales del mismo.

## **2. Objetivos alcanzados (Máximo 2 folios)**

Con el material desarrollado en este Proyecto se han alcanzado los objetivos propuestos inicialmente:

Objetivo 1: Se han elaborado una serie de fichas de reacciones químicas que servirán como base de partida para la elaboración de una base de datos de reacciones químicas que permitan mejorar la formación del alumno en el conocimiento de las reacciones químicas, lo que facilitará la selección para la puesta en marcha y parada del Chem-E-Car diseñado.

Objetivo 2: Se ha elaborado una guía metodológica que permitirá al alumno conocer las bases de la competición, los documentos necesarios que debe presentar para participar en ella, así como la manera de elaborarlos, incluyendo la organización y diferentes fuentes de información que faciliten la realización de los cálculos ingenieriles necesarios para diseñar el prototipo.

Objetivo 3: Se ha elaborado un cuestionario con preguntas relacionadas con las reglas de seguridad de la competición, con el fin de que los alumnos puedan identificar, analizar, valorar y controlar los distintos riesgos presentes en la reacción química seleccionada y establecer las medidas preventivas a adoptar para la eliminación y reducción de dichos riesgos. Como documentación de apoyo, se ha preparado un curso de seguridad que permita al alumno adquirir la formación previa necesaria para realizar dicho cuestionario y poder autoevaluarse. Además, se ha preparado una guía metodológica de seguridad que incluye las recomendaciones para el cumplimiento de las normas de seguridad de la competición.

Objetivo 4: Se ha elaborado material docente para guiar al alumno en la selección de los materiales de construcción más adecuados para cada parte del prototipo en el que se lleva a cabo la reacción.

Objetivo 5: El compendio de los requisitos medioambientales que debe cumplir el prototipo diseñado, con el fin de que el alumno aprenda a integrar los aspectos medioambientales en el prototipo diseñado, en particular, y en cualquier proyecto, de manera general, se ha incluido en la guía metodológica, elaborada para alcanzar el Objetivo 2; en el curso de seguridad y en la guía metodológica de seguridad, elaborados para alcanzar el Objetivo 3, y en el documento de ayuda para la selección de materiales, elaborado para alcanzar el Objetivo 4.

El proyecto ha transcurrido según lo planificado y, por tanto, se han alcanzado los objetivos planificados, sin producirse cambios o problemas durante el desarrollo del proyecto.

### 3. Metodología empleada en el proyecto (Máximo 1 folio)

La consecución de los objetivos se ha llevado a cabo mediante las siguientes actividades:

- **Actividad 1. Elaboración de una base de datos de reacciones químicas:** La elaboración de la base de datos de reacciones químicas ha partido de la selección de ejemplos de reacciones que generan un gas o un vapor que permita obtener presión para impulsar el prototipo y que no involucren compuestos con una toxicidad, reactividad o inflamabilidad NFPA mayor de 3. Para obtener la información detallada sobre cada reacción (reactivos, productos, condiciones, termodinámica y cinética, catalizadores, etc.) se han usado bases de datos de reacciones y fuentes bibliográficas.
- **Actividad 2. Guía metodológica para la elaboración de cálculos ingenieriles:** Esta guía metodológica permitirá al alumno conocer las bases de la competición, los documentos necesarios que debe presentar para participar en ella, así como la manera de elaborarlos, incluyendo la organización y diferentes fuentes de información que faciliten la realización de los cálculos ingenieriles necesarios para diseñar el prototipo. Esta guía indica también el nivel de detalle que ha de alcanzar el alumno en los cálculos y varios Anexos que incluyen seminarios y plantillas para elaborar el presupuesto y para incluir las especificaciones de cada una de las partes del prototipo diseñado.
- **Actividad 3. Evaluación de la Seguridad del Proceso:** Partiendo de las normas de seguridad del concurso Chem-E-Car que organiza AIChE se ha elaborado un curso que consta de unas presentaciones con los conocimientos de seguridad que el alumno debe dominar para predecir, evaluar y evitar los posibles riesgos durante la construcción y el funcionamiento del prototipo. También se ha preparado un cuestionario con preguntas de opción múltiple relacionadas con las reglas de seguridad de la competición, para que los alumnos se autoevalúen. Además, se ha preparado la guía metodológica de seguridad que facilitará a los alumnos el cumplimiento de las normas de seguridad de la competición.
- **Actividad 4. Selección de materiales:** La guía de selección de materiales elaborada ayudará al alumno a seleccionar el material del reactor, conducciones, válvulas y otros elementos que vayan a estar en contacto con los reactivos o productos bajo presión o a alta temperatura. Se tienen en cuenta las reacciones incluidas en la base de datos (Actividad 1).
- **Actividad 5. Evaluación ambiental:** El compendio de requisitos medioambientales y la lista de comprobación se ha incluido, a partir de las bases del concurso Chem-E-Car y de sus normas de seguridad, en la guía metodológica de la Actividad 2, en el curso de seguridad y en la guía metodológica de seguridad de la Actividad 3 y en la guía de selección de materiales de la Actividad 4.



#### 4. Recursos humanos (Máximo 1 folio)

Durante el desarrollo del Proyecto han participado los profesores y los doctorandos de los **tres grupos de investigación** de la Facultad de Químicas, según se presentó en la propuesta: dos grupos de investigación del **departamento de Ingeniería Química** (sección de Química Industrial-Grupo de Celulosa y Papel y Grupo de Físico-Química de Procesos Industriales y Medioambientales) y el Grupo de Ingeniería de Superficies y Materiales Nanoestructurados del **departamento de Ciencias de los Materiales e Ingeniería Metalúrgica**.

El Grupo de Celulosa y Papel, formado por los siguientes miembros, además de llevar a cabo la coordinación del proyecto, ha trabajado en las Actividades 2, 3 y 5, relacionadas con la guía metodológica, la seguridad y el impacto ambiental:

- C. Negro Álvarez (CU): Investigador responsable
- J. Tijero Miquel (CU).
- A. Blanco Suárez (TU).
- E. de la Fuente González (TU).
- M.C. Monte Lara (PCD).
- A. Tijero Cruz (PA).
- D. Hermosilla Redondo (Contrato con cargo a proyectos de investigación)
- I. Latour Romero (Becaria FPU)
- N. Merayo Cuevas (Contrato con cargo a proyectos de investigación)
- L. Cortijo Garrido (Contrato con cargo a proyectos de investigación)
- H. Barndok (Contrato con cargo a proyectos de investigación)
- P. López Expósito (Contrato con cargo a proyectos de investigación)
- L. Blanco Jaén (Contrato con cargo a proyectos de investigación)
- A. Balea Martín (Contrato con cargo a proyectos de investigación)
- J. Plaza Rodríguez (Técnico de laboratorio)

El Grupo de Físico-Química de Procesos Industriales y Medioambientales, formado por los siguientes miembros, ha trabajado en las Actividades 1 y 2, relacionadas con las reacciones químicas:

- F. García-Ochoa (CU).
- M. Ladero (TU).
- M.I. Guijarro (PCD).
- J. Esteban Serrano (Doctorando).
- M. Ravelo Velasquez (Doctorando).
- V. Ripoll Morales (Doctorando).
- A. Rodríguez Martín (Doctorando).
- M. Wojtusik (Doctorando).
- S. de La Morena López (Doctorando).

El Grupo de Ingeniería de Superficies y Materiales Nanoestructurados, formado por los siguientes miembros, ha trabajado principalmente en la Actividad 4, relacionada con los materiales:

- F. J. Pérez Trujillo (CU)
- M.S. Mato Díaz (PAD)
- G. Alcalá Penadés (PAD)
- H. Santos Barahona (Becario FPI)
- M.I. Lasanta Carrasco (Contrato con cargo a proyectos de investigación)
- T. de Miguel Gamo (Contrato con cargo a proyectos de investigación)
- G. García Martín (Contrato con cargo a proyectos de investigación)

## 5. Desarrollo de las actividades (Máximo 3 folios)

A continuación se describen las actividades realizadas:

### Actividad 1. Elaboración de una base de datos de reacciones químicas.

Se han seleccionado 15 reacciones químicas que generan gas o vapor con el fin de obtener la presión necesaria para impulsar o parar el prototipo. Para cada reacción se ha elaborado una ficha que incluye: la reacción de impulsión y/o parada, los materiales, las condiciones de operación, la información termodinámica y cinética y la bibliografía de apoyo. Las reacciones elegidas semuestran en la tabla 1. Las fichas se adjuntan en el **ANEXO 1**.

Tabla 1. Sistemas de generación de gases para impulsión y/o parada

Impulsión	Impulsión/Parada	Parada
1. Batería Ni-Metal Hidruro 2. Pila de combustible óxido de plomo (IV)- zinc en medio ácido 3. Batería alcalina (Zn- MnO <sub>2</sub> ) 4. Batería Daniel o Zn-Cu 5. Batería de Aluminio- Aire 6. Batería de Plomo-Ácido sulfúrico 7. Pila de combustible de membrana de intercambio protónico (PEMFC) 8. Combustión de bioetanol	9. Neutralización de ácido acético con bicarbonato de sodio 10. Descomposición de carbonato de sodio 11. Formación de una sal hidrácida 12. Descomposición catalítica de hidrazina 13. Descomposición de agua oxigenada catalizada por una catalasa	14. Reloj de yodo 15. Hidrólisis enzimática de o- nitrofenil-β-D- galactósido (ONPG)

### Actividad 2. Guía metodológica para la elaboración de cálculos ingenieriles.

La guía metodológica elaborada, basada en la información facilitada por AIChE, (**ANEXO 2**) incluye toda la información necesaria para la participación en la competición: objetivos, bases y desarrollo de la competición, descripción de los documentos necesarios, procedimiento detallado para la construcción del Chem-E-Car y los siguientes seminarios y plantillas de ayuda:

- Seminario “¿Cómo elaborar pósteres científicos?”: Material de ayuda para la preparación del poster que tienen que presentar los estudiantes el día de la competición describiendo el método de propulsión del vehículo mediante la reacción química, las características especiales del coche y las características medioambientales y de seguridad.
- Seminario “Conceptos básicos de reactores electrolíticos y células de combustible”: Material de apoyo para la realización de los cálculos necesarios para los balances de materia y energía.
- Seminario “Conceptos básicos de reactores”: Material de apoyo para el diseño del reactor o recipiente donde se lleva a cabo la reacción.

- Plantilla para la elaboración del presupuesto: Incluye todas las partidas necesarias para facilitar el cálculo del coste del prototipo.
- Tabla resumen para las especificaciones de los equipos. Esta plantilla facilita a los estudiantes el recuento de todas las piezas que forman parte del prototipo incluyendo sus especificaciones y características.

### **Actividad 3. Evaluación de la Seguridad del Proceso.**

Para llevar a cabo esta actividad, se han desarrollado los siguientes materiales didácticos:

- Curso de seguridad, en forma de presentación y desarrollado por AIChE, que incluye los conceptos y normas de seguridad de la competición que los estudiantes deben dominar para predecir, evaluar y evitar los posibles riesgos durante la construcción y el funcionamiento del prototipo (**ANEXO 3**).
- Cuestionario con 40 preguntas de opción múltiple relacionadas con las reglas de seguridad de la competición, desarrollado por AIChE, para que los estudiantes puedan autoevaluarse el grado de conocimiento de las normas de seguridad presentadas en el curso (**ANEXO 4**).
- Guía metodológica de seguridad, basada en la información facilitada por AIChE, para facilitar a los alumnos el cumplimiento de las normas de seguridad de la competición (**ANEXO 5**).

### **Actividad 4. Selección de materiales.**

En esta actividad se ha elaborado un documento de ayuda para la selección de los materiales y los requisitos medioambientales para el diseño de los componentes del prototipo (**ANEXO 6**). Además de incluir los materiales más adecuados para diferentes componentes, como tuberías, juntas tóricas, muelles o aislantes de bujías, se ha desarrollado un tutorial del Programa CES EduPack, software para la selección de materiales, que permite generar gráficos de propiedades, informes y consideraciones medioambientales.

### **Actividad 5. Evaluación ambiental.**

El compendio de requisitos medioambientales y la lista de comprobación se ha elaborado a partir de las bases del concurso Chem-E-Car y de sus normas de seguridad y han sido incluidas en la guía metodológica de la Actividad 2 (**ANEXO 2**), en el curso de seguridad (**ANEXO 3**) y en la guía metodológica de seguridad de la Actividad 3 (**ANEXO 5**) y en la selección de materiales (**ANEXO 6**).

### **Asistencia a la 2014 Chem-E-Car Competition**

Por otra parte, dentro de las actividades realizadas, cabe destacar también la asistencia del investigador responsable del Proyecto, el profesor Carlos Negro, y el técnico de laboratorio miembro del equipo, D. Jesús Plaza, junto con el capítulo de estudiantes formado por alumnos de segundo curso del grado de Ingeniería Química a la 2014 Chem-E-Car Competition celebrada el día **16 de Noviembre de 2014 en Atlanta**, dentro de la AIChE 2014 Annual Student Conference, para una primera toma de contacto con la competición.

## **5. Anexos**

ANEXO 1. Fichas de las reacciones químicas

ANEXO 2. Guía metodológica para la elaboración de cálculos ingenieriles

ANEXO 3. Curso de seguridad

ANEXO 4. Cuestionarios de seguridad

ANEXO 5. Guía metodológica de seguridad

ANEXO 6. Selección de materiales y requisitos medioambientales

## ANEXO 1

### FICHAS DE REACCIONES QUÍMICAS

## REACCIÓN DE IMPULSIÓN

### BATERÍA DE NÍQUEL-METAL HIDRURO (Ni-MH)

Ánodo:



Cátodo:



Reacción completa:



### MATERIALES

“M” es un compuesto intermetálico. Dos clases:

- $\text{AB}_5$ : Donde A es una mezcla de elementos de las “tierras raras”, como por ejemplo lantano, cerio, neodimio o praseodimio; mientras que B puede ser níquel, cobalto, manganeso o aluminio
- $\text{AB}_3$ : Donde A es titanio o vanadio y B es circonio o níquel, modificados con cromo, cobalto, hierro y/o manganeso

El electrolito más empleado es KOH (hidróxido de potasio), siendo el electrodo positivo un hidróxido de níquel y el electrodo negativo el hidruro metálico que almacena protones

La separación del cátodo y del ánodo se realiza mediante poliolefinas hidrofílicas no tejidas

### CONDICIONES DE OPERACIÓN

Temperatura ambiente (20-30 °C)

Presión atmosférica

### INFORMACIÓN TERMODINÁMICA Y CINÉTICA

Voltaje necesario para carga de batería: 1.4 a 1.6 V/célula

Voltaje de descarga: 1.25 V/célula de media, empezando a un valor de 1.4 hasta 1.1 a 1.0 V/célula

Capacidad inicial de descarga (C): En torno a 350 mAh·g<sup>-1</sup>

### Bibliografía

[http://en.wikipedia.org/wiki/Nickel%E2%80%93metal\\_hydride\\_battery#cite\\_note-21](http://en.wikipedia.org/wiki/Nickel%E2%80%93metal_hydride_battery#cite_note-21)

Andreas, O.; Güther, V.; *Development of fast kinetics metal hydride alloys and battery electrodes for high power applications*; (1999) Journal of Alloys and Compounds; Vol. 293-295 (734-736)

Scheider, E. L.; Oliveira, C. T.; Brito, R. M.; Malfatti C. F.; *Classification of discarded NiMH and Li-Ion batteries and reuse of the cells still in operational conditions in prototypes*; (2014) Journal of Power Sources; Vol. 262 (1-9)

## REACCIÓN DE IMPULSIÓN

### PILA DE COMBUSTIBLE ÓXIDO DE PLOMO (IV)-ZINC EN MEDIO ÁCIDO

Ánodo:  $\text{Zn (s)} \leftrightarrow \text{Zn}^{2+}(\text{aq}) + 2\text{e}^-$

Cátodo:  $\text{PbO}_2(\text{s}) + \text{SO}_4^{2-}(\text{aq}) + 4\text{H}^+ + 2\text{e}^- \leftrightarrow \text{PbSO}_4(\text{s}) + 2\text{H}_2\text{O (l)}$

Reacción global:  $\text{Zn (s)} + \text{PbO}_2(\text{s}) + 2\text{SO}_4^{2-}(\text{aq}) + 4\text{H}^+ \leftrightarrow \text{PbSO}_4(\text{s}) + \text{ZnSO}_4(\text{aq}) + 2\text{H}_2\text{O (l)}$

### MATERIALES

Láminas de óxido de plomo IV y zinc en las células del ánodo y el cátodo.

Disolución concentrada de ácido sulfúrico en ambas células.

Conductores eléctricos entre ánodo y cátodo.

Puente salino entre ánodo y cátodo para separar ambas disoluciones.

### CONDICIONES DE OPERACIÓN

Temperatura ambiente (20-30 °C).

Presión atmosférica.

### INFORMACIÓN TERMODINÁMICA Y CINÉTICA

#### Potenciales de los electrodos

Ánodo (Zn/Zn<sup>2+</sup>):  $E^0 = 0,76 \text{ V}$ .

Cátodo (PbO<sub>2</sub>/PbSO<sub>4</sub>):  $E^0 = 1,69 \text{ V}$ .

Global (Zn/Zn<sup>2+</sup> | PbO<sub>2</sub>/PbSO<sub>4</sub>):  $\Delta E^0 = 2,45 \text{ V}$ .

#### Información adicional

El ácido sulfúrico es una sustancia extremadamente corrosiva que reacciona violentamente con el agua y los compuestos orgánicos desprendiendo calor, por lo que su manejo requiere de todo tipo de medidas de seguridad corporales. Los compartimentos de ánodo y cátodo deben estar confinados en células de materiales resistentes a la corrosión, como el acero inoxidable. El sulfato de plomo (PbSO<sub>4</sub>) es tóxico y corrosivo por inhalación, ingestión y contacto, de modo que en ningún caso debe manipularse el cátodo de esta pila después de ponerla en funcionamiento.

El sulfato de zinc (ZnSO<sub>4</sub>) es nocivo por ingestión, tóxico y puede causar lesiones oculares graves al contacto directo con los ojos, de modo que deben establecerse medidas adicionales de seguridad en la célula del ánodo tras la puesta en marcha de la pila de combustible.

#### Bibliografía

[http://www.pps.k12.or.us/district/depts/edmedia/videoteca/curso3/htmlb/SEC\\_83.HTMPakd ehi](http://www.pps.k12.or.us/district/depts/edmedia/videoteca/curso3/htmlb/SEC_83.HTMPakd ehi),

Peña-Martínez, J.; Pérez-Coll, D.; Ruiz-Morales, J.C.; Marrero-López D.; Núñez Coello P. "Pilas de combustible". *An. Quím* 2006, 102(3), 22-30.

## REACCIÓN DE IMPULSIÓN

### BATERÍA ALCALINA (Zn-MnO<sub>2</sub>)

Ánodo:	$\text{Zn (s)} + 2\text{OH}^- (\text{aq}) \rightarrow \text{ZnO (s)} + \text{H}_2\text{O (s)} + 2\text{e}^-$
Cátodo:	$2\text{MnO}_2 (\text{s}) + \text{H}_2\text{O (l)} + 2\text{e}^- \rightarrow \text{Mn}_2\text{O}_3 (\text{s}) + 2\text{OH}^- (\text{aq})$
Reacción completa:	$\text{Zn (s)} + 2\text{MnO}_2 (\text{s}) \rightarrow \text{ZnO (s)} + \text{Mn}_2\text{O}_3 (\text{s})$

### MATERIALES

El ánodo (Zn (s)) se elabora a partir de una pasta de zinc sólido

El cátodo consiste en una mezcla de MnO<sub>2</sub> con grafito, normalmente en una proporción alta de MnO<sub>2</sub>

El electrolito más empleado es NaOH (hidróxido de sodio)

La separación del cátodo y del ánodo se puede realizar mediante filtro de papel empapado en el electrolito (NaOH) para favorecer la conductividad

### CONDICIONES DE OPERACIÓN

Temperatura ambiente (20-30 °C)

Presión atmosférica

### INFORMACIÓN TERMODINÁMICA Y CINÉTICA

Parámetros termodinámicos:

- $E_{\text{ánodo}}: -1.28 \text{ V}$
- $E_{\text{cátodo}}: 0.15 \text{ V}$
- $\Delta E_{\text{total}}: 1.43 \text{ V}$

Voltaje nominal: 1.5 V.

El voltaje medio de descarga oscila entre 1.1 y 1.3 V.

Capacidad de la batería: Entre 700 y 3000 mAh, dependiendo de la intensidad de la carga utilizada

### Bibliografía

[http://en.wikipedia.org/wiki/Alkaline\\_battery](http://en.wikipedia.org/wiki/Alkaline_battery)

Lim, H. S.; Verzwylt, S. A.; *Effects of electrode thickness on power capability of a sintered-type nickel electrode*; (1996) Journal of Power sources; Vol. 62 (41-44)

Shruthi, B.; Raju, V. B.; Madhu, B. J.; *Synthesis, spectroscopics and electrochemical performance of pasted  $\beta$ -nickel hydroxide electrode in alkaline electrolyte*; (2015) Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy; Vol. 135 (683-689)



## REACCIÓN DE IMPULSIÓN

### BATERÍA Zn-Cu (Pila Daniel)

Ánodo (oxidación):  $\text{Zn}_{(s)} \rightarrow \text{Zn}^{2+}_{(ac)} + 2e^{-}$

Cátodo (reducción):  $\text{Cu}^{2+}_{(ac)} + 2e^{-} \rightarrow \text{Cu}_{(s)}$

Reacción Global:  $\text{Zn}_{(s)} + \text{Cu}^{2+}_{(ac)} \leftrightarrow \text{Zn}^{2+}_{(ac)} + \text{Cu}_{(s)}$

### MATERIALES

Electrodo de cobre (cátodo), electrodo de zinc (ánodo), disolución de  $\text{CuSO}_4$  1M para la semicelda de reducción, disolución de  $\text{ZnSO}_4$  1M para la semicelda de oxidación y disolución de  $\text{KNO}_3$  0.2M para el puente salino o placa porosa para separar las semiceldas.

### CONDICIONES DE OPERACIÓN

Temperatura ambiente, presión atmosférica.

### INFORMACIÓN TERMODINÁMICA Y CINÉTICA

$$E^0_{\text{Zn}^{2+}/\text{Zn}^0} = -0,76 \text{ V}$$

$$E^0_{\text{Cu}^{2+}/\text{Cu}^0} = +0,34 \text{ V}$$

### Bibliografía

<http://aulas.iesjorgemanrique.com/calculus/quimica/practicaslab/piladaniell/piladaniell.html>

[http://www.funsci.com/fun3\\_en/electro/electro.htm](http://www.funsci.com/fun3_en/electro/electro.htm)

Winter, M.; J. Brodd, R. "What Are Batteries, Fuel Cells, and Supercapacitors?". *Chemical Reviews*, 2004, Vol. 104, No. 10.

---

## REACCIÓN DE IMPULSIÓN

---

### BATERÍA ALUMINIO-AIRE

Electrodo positivo:  $\text{O}_2(\text{g}) + 2\text{H}_2\text{O}(\text{l}) + 4\text{e}^- \rightarrow 4\text{OH}^-(\text{ac})$

Electrodo negativo:  $\text{Al}(\text{s}) + 3\text{OH}^-(\text{ac}) \rightarrow \text{Al}(\text{OH})_3(\text{s}) + 3\text{e}^-$

Reacción global:  $4\text{Al}(\text{s}) + 3\text{O}_2(\text{g}) + 6\text{H}_2\text{O}(\text{l}) \rightarrow 4\text{Al}(\text{OH})_3(\text{s})$

### MATERIALES

Electrodo de aluminio, hidróxido sódico como electrolito, manganato potásico como catalizador del proceso de oxidación, carbón activado en el cátodo para favorecer la captación de oxígeno.

### CONDICIONES DE OPERACIÓN

Temperatura ambiente

Presión atmosférica

### INFORMACIÓN TERMODINÁMICA Y CINÉTICA

Voltaje teórico: 2,7V

#### **Bibliografía:**

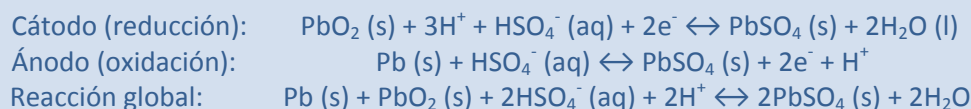
Shaohua Yang, Harold Knickle. Design and analysis of aluminum/air battery system for electric vehicles. *Journal of Power Sources* 112 (2002) 162–173.

D. D. Macdonald, C. English. Development of anodes for aluminium/air batteries — solution phase inhibition of corrosion. *Journal of Applied Electrochemistry* (1990) Volume 20, Issue 3, pp 405-417.

---

## REACCIÓN DE IMPULSIÓN

### BATERÍA DE PLOMO-ÁCIDO SULFÚRICO



### MATERIALES

Disolución acuosa de ácido sulfúrico en agua al 35% en peso.

Láminas de plomo dispuestas alternadamente en cuanto a su polaridad (alternancia positiva-negativa).

Las láminas de polaridad positiva llevan un revestimiento de óxido de plomo (IV), mientras que las de polaridad negativa están compuestas de plomo esponjoso.

La batería completa está formada por un depósito de ácido sulfúrico, dentro del cual se encuentran el conjunto de las placas de plomo.

### CONDICIONES DE OPERACIÓN

Temperatura de carga: mín. -40°C; máx. 50°C

Presión atmosférica

Durante la descarga se invierten las reacciones. Cada célula tiene entre 500 y 800 ciclos de duración, hasta que la formación de cristales de sulfato de plomo (II) impide la circulación óptima de las cargas en la célula.

El proceso genera agua, disminuyendo en cada ciclo la concentración de la disolución de ácido.

### INFORMACIÓN TERMODINÁMICA Y CINÉTICA

#### Potenciales de cada célula

Ánodo (Pb/PbSO<sub>4</sub>):  $E^0 = 0,36 \text{ V}$ .

Cátodo (PbO<sub>2</sub>/PbSO<sub>4</sub>):  $E^0 = 1,68 \text{ V}$ .

Potencial Global (Pb/PbSO<sub>4</sub> || PbO<sub>2</sub>/PbSO<sub>4</sub>):  $\Delta E^0 = 2,04 \text{ V}$ .

#### Información adicional

El ácido sulfúrico es una sustancia extremadamente corrosiva que reacciona violentamente con el agua y los compuestos orgánicos desprendiendo calor, por lo que su manejo requiere de todo tipo de medidas de seguridad corporales. Los compartimentos de ánodo y cátodo deben estar confinados en células de materiales resistentes a la corrosión, como el acero inoxidable.

El sulfato de plomo (PbSO<sub>4</sub>) es tóxico y corrosivo por inhalación, ingestión y contacto, de modo que en ningún caso debe manipularse el cátodo de esta pila después de ponerla en funcionamiento.

#### Bibliografía

<http://www2.ignatius.edu/faculty/decarlo/EarthToMoon/pages/LeadAcidBatteryLesson9-12.htm>

Osaki, S. "Lead-Acid Storage Battery" United States Patent Application 20140363724. Disponible en la web: <http://www.freepatentsonline.com/y2014/0363724.html>

## REACCIÓN DE IMPULSIÓN

### PILA DE COMBUSTIBLE DE MEMBRANA DE INTERCAMBIO PROTÓNICO (PEMFC)

Ánodo	$\text{H}_2 \rightarrow 2\text{H}^+ + 2\text{e}^-$
Cátodo	$\text{O}_2 + 4\text{H}^+ + 4\text{e}^- \rightarrow 2\text{H}_2\text{O}$
Reacción global	$2\text{H}_2 + \text{O}_2 \rightarrow 2\text{H}_2\text{O}$

### MATERIALES

El ánodo se alimenta con combustible ( $\text{H}_2$ ), que se introduce en exceso sobre el electrodo  
El cátodo es alimentado con aire, y se genera como resultado de la reacción agua y calor  
El electrodo empleado es una membrana polimérica que es capaz de conducir protones ( $\text{H}^+$ ), mientras que bloquea el paso de los electrones  
La separación del hidrógeno se facilita empleando un catalizador, normalmente platino u óxido de cerio (IV)

### CONDICIONES DE OPERACIÓN

Temperatura de operación: De 50 a 100 °C, peor rendimiento a temperaturas superiores  
Presión atmosférica

### INFORMACIÓN TERMODINÁMICA Y CINÉTICA

Parámetros termodinámicos:

- $E_{\text{ánodo}}$ : 0 V
- $E_{\text{cátodo}}$ : 1.2 V
- $\Delta E_{\text{TOTAL}}$ : 1.22 V

Eficacia: En torno a 40 – 60 %. Las pérdidas se pueden deber a pérdidas de activación, pérdidas Óhmicas y pérdidas debidas al transporte de materia

Baterías de larga duración, de más de 1000 h de descarga

### Bibliografía

[http://en.wikipedia.org/wiki/Proton\\_exchange\\_membrane\\_fuel\\_cell](http://en.wikipedia.org/wiki/Proton_exchange_membrane_fuel_cell)

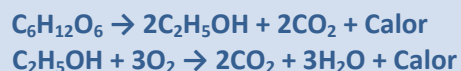
Wang, F.-Ch.; Gao, Ch.-Y.; Li, S.-Ch.; *Impacts of power management on a PEMFC electric vehicle*; (2014) International Journal of Hydrogen Energy; Vol. 39 (17336-17346)

Kanani, H.; Shams, M.; Hasheminasab, M.; Bozorgnezhad, A.; *Model development and optimization of operating conditions to maximize PEMFC performance by response surface methodology*; (2015) Energy Conversion and Management; Vol. 93 (9-22)

## REACCIÓN DE IMPULSIÓN

### COMBUSTIÓN DE BIOETANOL

Reacción de producción de bioetanol  
Reacción de combustión



### MATERIALES

El bioetanol se obtiene a través de la fermentación de la glucosa. La fuente de glucosa puede ser muy variada, aunque se emplea principalmente maíz y caña de azúcar

La materia prima empleada puede requerir una hidrólisis química o enzimática previa

Una vez obtenido el bioetanol por fermentación, es necesario realizar un proceso de separación conocido como deshidratación. Suele consistir, principalmente, en una destilación azeotrópica

El bioetanol es altamente higroscópico, por lo que tiene tendencia a formar dos fases en contacto con agua. Es necesario su almacenamiento estanco

El bioetanol puede funcionar en un motor de combustión interna similar al de gasolina, con unos rendimientos y parámetros similares, pero específicamente diseñado para su utilización.

### CONDICIONES DE OPERACIÓN

Temperatura de combustible superior a 15°C

Presión atmosférica

### INFORMACIÓN TERMODINÁMICA Y CINÉTICA

Parámetros termodinámicos:

- Calor de combustión: En torno a 1300 kJ·mol<sup>-1</sup>

Octanaje máximo de 130

Ratio de compresión de etanol/aire de 19.5

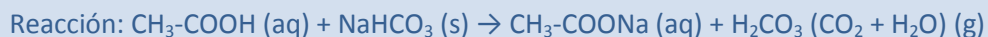
### Bibliografía

[http://en.wikipedia.org/wiki/Ethanol\\_fuel](http://en.wikipedia.org/wiki/Ethanol_fuel)

Hedfi, H.; Jedli, H.; Jbara, A.; Slimi, K.; *Modelling of a bioethanol combustion engine under different operating conditions*; (2014) Energy Conversion and Management; Vol. 88 (808-820)

## REACCIÓN DE IMPULSIÓN

### NEUTRALIZACIÓN DE ÁCIDO ACÉTICO CON BICARBONATO DE SODIO



### MATERIALES

Bicarbonato sódico (Nº CAS: 144-55-8).

Ácido acético glacial (99%): Nº CAS 64-19-7.

Cámara de reacción cerrada y encamisada con un émbolo de expansión y un puerto de inyección

### CONDICIONES DE OPERACIÓN

Temperatura ambiente (20-30 °C).

Presión atmosférica al inicio (dentro del reactor). Requiere el diseño de un sistema de control de presión a la salida de la cámara de reacción debido a la generación de CO<sub>2</sub> (no se recomienda superar 160 psig).

El movimiento del vehículo se produce por el movimiento de un pistón por parte del dióxido de carbono generado en la reacción.

La exposición prolongada al ácido acético glacial puede provocar mareos, dolor de garganta, vómitos, irritación de los ojos y la piel, visión borrosa o quemaduras profundas. Evitar el contacto directo con esta sustancia.

### INFORMACIÓN TERMODINÁMICA Y CINÉTICA

Reacción reversible y endotérmica

$$(-\Delta H)_R = 35,77 \text{ kJ/mol}$$

Reacción de equilibrio ácido-base

$$K_{eq} = \frac{[\text{H}^+][\text{CH}_3\text{COO}^-]}{[\text{CH}_3\text{COOH}]} = 1,8 \cdot 10^{-5}$$

#### Bibliografía

[http://es.wikipedia.org/wiki/Bicarbonato\\_de\\_sodio](http://es.wikipedia.org/wiki/Bicarbonato_de_sodio)

Urbano, L., 2012. "Endothermic Reactions: Vinegar and Baking Soda", Retrieved February 2nd, 2015, from Montessori Muddle: <http://MontessoriMuddle.org/>

#### Observación

La reacción también se puede utilizar, calibrando bien la velocidad y el recorrido del pistón que acciona un interruptor, para detener coches movidos por energía eléctrica

## REACCIÓN DE IMPULSIÓN

### DESCOMPOSICIÓN DE CARBONATO DE SODIO

Reacción:  $\text{Na}_2\text{CO}_3 (\text{s}) + 2\text{HCl} (\text{aq}) \rightarrow 2\text{NaCl} (\text{aq}) + \text{H}_2\text{O} (\text{l}) + \text{CO}_2$

### MATERIALES

Carbonato de sodio en polvo, encerrado en un depósito dosificador previo a reacción.  
Disolución de ácido clorhídrico (HCl) concentrada al 37% en peso.  
Reactor batch líquido-sólido y encamisado con un émbolo de expansión y un puerto de inyección.

### CONDICIONES DE OPERACIÓN

Temperatura ambiente (20-30 °C)  
Presión atmosférica al inicio (dentro del reactor)

### INFORMACIÓN TERMODINÁMICA Y CINÉTICA

La reacción es instantánea e irreversible, generando una gran cantidad de dióxido de carbono, que se utiliza como gas de impulsión para el movimiento del vehículo, a través de su paso por un pistón.

La cantidad de  $\text{CO}_2$  generada se puede controlar regulando la proporción en la que se mezclan los reactivos, especialmente el carbonato de sodio, ya que la transformación es instantánea.

El cloruro de hidrógeno es extremadamente ácido y corrosivo, por lo que debe estar confinado en una cámara protectora, que hará las veces de reactor. Se recomienda que ésta esté formada por materiales resistentes a esta sustancia, como el acero inoxidable

#### Cinética preliminar

Orden global (y respecto al carbonato de sodio): 1  
Selectividad a dióxido de carbono: 95%

#### Bibliografía

[http://es.wikipedia.org/wiki/Carbonato\\_de\\_sodio](http://es.wikipedia.org/wiki/Carbonato_de_sodio)

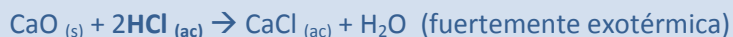
La reacción completa puede verse con claridad en el siguiente vídeo:  
<https://www.youtube.com/watch?v=JmRO2Fi5S3g>

#### Observación

La reacción también se puede utilizar, calibrando bien la velocidad y el recorrido del pistón que acciona un interruptor, para detener coches movidos por energía eléctrica

## REACCIÓN DE IMPULSIÓN

### FORMACIÓN DE UNA SAL HIDRÁCIDA



### MATERIALES

CaO sólido y HCl en disolución.

Semiconductores de tipo N y P para transformar la diferencia de temperaturas en energía eléctrica (efecto termoeléctrico)

### CONDICIONES DE OPERACIÓN

La temperatura puede alcanzar 110 °C

Presión atmosférica

### INFORMACIÓN TERMODINÁMICA Y CINÉTICA

Reacción irreversible y exotérmica

$$(-\Delta H)_R = -795,4 \text{ kJ/mol}$$

#### Bibliografía

[http://www.update.uu.se/~jolkkonen/pdf/CRC\\_TD.pdf](http://www.update.uu.se/~jolkkonen/pdf/CRC_TD.pdf)

Li, M; Shaw, H. "Reaction Kinetics of Hydrogen Chloride with Calcium Oxide by Fourier Transform Infrared Spectroscopy". *Ind. Eng. Chem. Res.* (2000) 39 1898-1902.

Lon E. Bell. "Cooling, Heating, Generating Power, and Recovering Waste Heat with Thermoelectric Systems". *Science* 12 September 2008: Vol. 321 no. 5895 pp. 1457-1461.

#### Observación

La reacción también se puede utilizar, calibrando bien la velocidad y el recorrido del pistón que acciona un interruptor, para detener coches movidos por energía eléctrica



## REACCIÓN DE IMPULSIÓN

### DESCOMPOSICIÓN CATALÍTICA DE HIDRAZINA

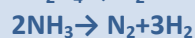
Reacción 1: descomposición de hidrazina



Reacción 2: formación de amoníaco



Reacción 3: descomposición de amoníaco



### MATERIALES

Solución al 35% de hidracina en agua

Catalizador de níquel-iridio nanoparticulado (suspensión en agua)

Reactor batch cerrado y encamisado con un émbolo de expansión y un puerto de inyección

### CONDICIONES DE OPERACIÓN

Temperatura ambiente (20-30 °C)

Presión atmosférica al inicio (dentro del reactor)

### INFORMACIÓN TERMODINÁMICA Y CINÉTICA

Reacciones irreversibles y exotérmicas

Reacción 1  $(-\Delta H)_R = -95,4 \text{ kJ/mol}$

Reacción 2  $(-\Delta H)_R = -157 \text{ kJ/mol}$

Reacción 3  $(-\Delta H)_R = 46,2 \text{ kJ/mol}$

Cinética preliminar

Orden global (y respecto a la hidracina): 1

Constante cinética global:  $\sim 47 \text{ s}^{-1}$  (30°C)

Selectividad a hidrógeno (y nitrógeno): 99,6%

### Bibliografía

<http://en.wikipedia.org/wiki/Hydrazine>

Pakdehi, S.G.; Salimi, M.; Rasoolzadeh, M. "A Review on Decomposition of Hydrazine and Its Kinetics as a Novel Approach for CO-Free  $\text{H}_2$  Production" *Res. Appl. Mech. Eng.* **3** (2014) 21-25.

Zheng, M. "A novel approach for CO-free  $\text{H}_2$  production via catalytic decomposition of hydrazine" *Int. J. Hydrogen Energy* **3** (2005) 1081-1089.

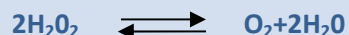
Singh, S.K.; Xu, Q. "Bimetallic nickel-iridium nanocatalysts for hydrogen generation by decomposition of hydrous hydrazine" *Chem. Comm.* **35** (2010) 6545-6547.

### Observación

La reacción también se puede utilizar, calibrando bien la velocidad y el recorrido del pistón que acciona un interruptor, para detener coches movidos por energía eléctrica

**REACCIÓN DE IMPULSIÓN: MUEVE UN PISTÓN ACOPLADO A UN ENGRANAJE Y A UN TORNILLO SIN FIN O IMPULSA POR CHORRO DE GAS PRESURIZADO QUE SE LIBERA**

**DESCOMPOSICIÓN DE AGUA OXIGENADA CATALIZADA POR UNA CATALASA**



#### **MATERIALES**

Agua oxigenada 3%

Tampón  $\text{Na}_2\text{CO}_3/\text{NaHCO}_3$  50 mM pH 9,5 para diluir el agua oxigenada.

Fuente de catalasa: enzima adsorbida en carbón activo o diluida en el tampón (por ejemplo, Thermanox o Catzyme 25 L, de Novozymes), patatas machacadas o hígado triturado, entre otras fuentes.

#### **CONDICIONES DE OPERACIÓN**

Temperatura ambiente hasta 30-35°C (termostatar con un baño o camisa de agua templada, la camisa estará aislada en su parte externa)

Presión atmosférica

#### **INFORMACIÓN TERMODINÁMICA Y CINÉTICA**

Reacción irreversible al liberarse una fase gas desde la fase líquida donde se da la reacción.

Cinética muy dependiente de la temperatura (máxima a 30-35 °C), el pH (máxima a pH algo básico, 9-10) y proporcional a la concentración de enzima.

#### **Bibliografía:**

Beers, R.F., Sizer, I.W. "A spectrophotometric method to measure breakdown of hydrogen peroxide by catalase" J. Biol. Chem. (1952) 195:133-140.

URL: <http://www.jbc.org/content/195/1/133.full.pdf>

Un procedimiento de laboratorio en el que se usa patata molida:

[http://www.techknow.org.uk/wiki/index.php?title=The\\_effect\\_of\\_temperature\\_on\\_catalase](http://www.techknow.org.uk/wiki/index.php?title=The_effect_of_temperature_on_catalase)

Otro en el que se utiliza levadura de panadería:

[http://www.nt.ntnu.no/users/preisig/Repository/TKP\\_4110\\_Felles\\_Lab/experiment%20descriptions/Full%20description%20yeast%20experiment.pdf](http://www.nt.ntnu.no/users/preisig/Repository/TKP_4110_Felles_Lab/experiment%20descriptions/Full%20description%20yeast%20experiment.pdf)

#### **Observación**

La reacción también se puede utilizar, calibrando bien la velocidad y el recorrido del pistón que acciona un interruptor, para detener coches movidos por energía eléctrica

## REACCIÓN DE PARADA: ACCIONA UN INTERRUPTOR ÓPTICO AL IMPEDIR LA LLEGADA DE LUZ DE UN LED A UN FOTODETECTOR

### RELOJ DE YODO



### MATERIALES

Reactivos: Yodato potásico ( $\text{KIO}_3$ ), Hidrogenosulfito de sodio ( $\text{NaHSO}_3$ ), almidón

### CONDICIONES DE OPERACIÓN

Temperatura ambiente (20-30 °C)

Presión atmosférica

### INFORMACIÓN TERMODINÁMICA Y CINÉTICA

La Reacción 1 determina la velocidad del proceso. Si se varía la concentración del ión  $\text{IO}_3^-$  se puede variar la velocidad de todo el proceso.

La Reacción 2 es muy rápida y la aparición del complejo almidón-pentayoduro de color azul indica que la Reacción 1 ha concluido.

El tiempo en el que la disolución cambia de incolora a azul-negra depende de varios factores: disminuye si se aumentan las concentraciones iniciales de yodato y/o hidrogenosulfito, si se aumenta la temperatura de la disolución o si se reduce el pH por la adición de ácido.

Notas: Esta reacción podría utilizarse junto con un foto-sensor para la parada del coche una vez que el color azul sea detectado. El tiempo en el que aparece el complejo coloreado puede controlarse cambiando las condiciones en las que la reacción tiene lugar. Se puede emplear peróxido de hidrógeno como reactivo en lugar de hidrogeno sulfito de sodio.

### Bibliografía:

Prem D. Sattsangi. A Microscale Approach to Chemical Kinetics in the General Chemistry Laboratory: The Potassium Iodide Hydrogen Peroxide Iodine-Clock Reaction. *J. Chem. Educ.*, (2011), 88 (2), pp 184–188.

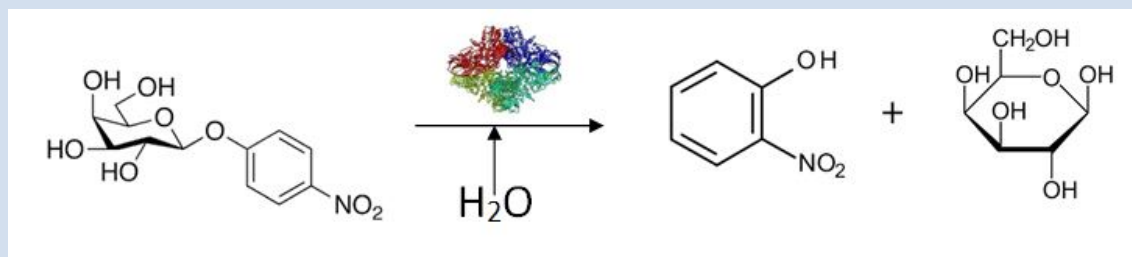
<http://www.nuffieldfoundation.org/practical-chemistry/iodine-clock-reaction>

C. D. Torres, M. L. A. Muñoz. Reacciones encadenadas: del reloj de yodo al arco iris químico. *Revista Eureka sobre Enseñanza y Divulgación de las Ciencias* (2011) 8 (1), 105-110.

P. Verdú. Reacción reloj: retraso en la reacción de yodo con almidón. Utilización en el aula. (2000) *Quark, A pie de aula*.

REACCIÓN DE PARADA: ACCIONA UN INTERRUPTOR ÓPTICO AL IMPEDIR LA LLEGADA DE LUZ DE UN LED A UN FOTODETECTOR

#### HIDRÓLISIS ENZIMÁTICA DE o-NITROFENIL-β-D-GALACTÓSIDO (ONPG)



#### MATERIALES

Tampón  $\text{Na}_2\text{HPO}_3/\text{NaH}_2\text{PO}_3$  50 mM pH 7,2 como medio de reacción. En él se disuelve el ONPG a una concentración 0,25 g/L.

Fuente de  $\beta$ -galactosidasa: enzima adsorbida en carbón activo o diluida en el tampón (por ejemplo, Lactozym 6500 HG, de Novozymes).

#### CONDICIONES DE OPERACIÓN

Temperatura ambiente (20-30 °C)

Presión atmosférica

#### INFORMACIÓN TERMODINÁMICA Y CINÉTICA

Reacción irreversible por el gran exceso de agua.

Cinética muy dependiente de la temperatura (máxima a 30-35 °C), el pH (máxima a pH neutro) y proporcional a la concentración de enzima. La reacción se puede catalizar con bases pero es menos controlable (lo positivo es que el o-nitrofenol es más amarillo a pH más básico).

#### Bibliografía:

Hussain, Q. "β-Galactosidases and their potential applications: a review". Critical Reviews in Biotechnology (2010) 30(1): 41–62.

URL: [https://bio.uqam.ca/upload/files/etudiants\\_menu\\_principal/ressources/articles/husain%202010.pdf](https://bio.uqam.ca/upload/files/etudiants_menu_principal/ressources/articles/husain%202010.pdf)

Un guión de una práctica de laboratorio de cinética enzimática:

[http://xray.bmc.uu.se/Courses/KE7001per4/Labs/enz\\_kinetics\\_lab.html](http://xray.bmc.uu.se/Courses/KE7001per4/Labs/enz_kinetics_lab.html)

Una tesis doctoral con varios procedimientos experimentales:

<http://biblioteca.ucm.es/tesis/19972000/X/0/X0043802.pdf>

## ANEXO 2

# GUÍA METODOLÓGICA PARA LA ELABORACIÓN DE CÁLCULOS INGENIERILES

*(Basada en la información facilitada por AIChE)*

## CONTENIDOS:

<b>1. Objetivos de la competición anual de Chem-E-Car .....</b>	<b>1</b>
<b>2. Desarrollo de la competición.....</b>	<b>1</b>
2.1. Competición de pósteres .....	1
2.2. Competición de rendimiento del Chem-E-Car .....	2
2.2.1. Carga y distancia a recorrer.....	2
2.2.2. Área de recorrido y medición de la distancia a la línea de meta.....	2
2.2.3. Desarrollo de las carreras .....	3
2.2.4. Consideraciones generales del sistema de propulsión del vehículo .....	3
2.2.5. Tamaño del vehículo .....	4
2.2.6. Recipiente para la carga de agua.....	4
2.2.7. Miembros del equipo.....	5
<b>3. Elaboración de los documentos necesarios.....</b>	<b>5</b>
3.1. ðEngineering Documentation Packageö (EDP) .....	5
3.2. Elaboración del póster .....	6
3.3. Presupuesto .....	6
3.4. ðCheck listö de requisitos medioambientales.....	6
<b>4. Procedimiento para construir el Chem-E-Car y participar en la competición.....</b>	<b>7</b>
4.1. Formación del grupo.....	7
4.2. ¿Qué reacción propulsará el prototipo? .....	8
4.3. Balances de materia y energía. Cálculos estequiométricos .....	8
4.3.1. Prototipos impulsados por energía eléctrica.....	9
4.3.2. Prototipos impulsados por energía mecánica.....	10
4.3.3. Prototipos impulsados por energía térmica.....	10
4.3.4. Alternativas .....	10
4.4. Diseño preliminar .....	10
4.4.1. Construcción del diagrama de flujo .....	10
4.4.2. Dimensionado del reactor.....	11
4.4.3. Estimación del presupuesto.....	12
4.4.4. Estimación de la presión máxima de operación.....	12
4.4.5. Válvula de alivio de emergencia.....	12
4.5. Búsqueda de un tutor.....	13
4.6. Diseño de detalle .....	13
4.7. Presupuesto del prototipo .....	14
4.8. Aprobación del tutor.....	14
4.9. Cálculo de la presión máxima de operación .....	15
4.10. Selección definitiva de la válvula de alivio y cálculo del caudal másico de gas aliviado .....	15
4.11. Certificación de la presión máxima de operación con agua .....	15
4.12. Construcción del prototipo .....	16

4.13. Pruebas en laboratorio .....	16
4.14. Hoja del cálculo de la cantidad de reactivos.....	17
4.15. Elaboración del EDP con los datos definitivos.....	17
4.16. Elaboración del póster .....	19
4.17. Inscripción en el concurso .....	19

ANEXO 1. Seminario ¿Cómo elaborar pósteres científicos?

ANEXO 2. Conceptos básicos de reactores electrolíticos y células de combustible

ANEXO 3. Conceptos básicos de reactores

ANEXO 4. Plantilla para la elaboración del presupuesto

ANEXO 5. Tabla resumen para las especificaciones de los equipos

## **1. Objetivos de la competición anual de Chem-E-Car**

Los objetivos de esta competición son:

- Proporcionar a los estudiantes de Ingeniería Química la oportunidad de participar en una estrategia de equipo para involucrarse en el diseño y la construcción de un pequeño vehículo impulsado mediante una reacción química (Chem-E-Car);
- Demostrar la capacidad de controlar de forma segura una reacción química mediante la variación de un reactivo químico;
- Diseñar y construir un vehículo que se alimente con una fuente de energía química, capaz de transportar una carga específica durante una distancia dada y de detenerse en la meta fijada;
- Animar a los estudiantes a participar activamente en su sociedad profesional;
- Aumentar el conocimiento de la Ingeniería Química en el público en general, en la industria, en los educadores y en otros estudiantes.

## **2. Desarrollo de la competición**

La competición, de carácter anual, se lleva a cabo junto con la Conferencia Anual de Estudiantes en la sede de la Reunión Anual de AIChE. Consta de una sesión de pósters y de una sesión de rendimiento del Chem-E-Car.

Se aceptan un máximo de 31 inscripciones de automóviles, permitiéndose sólo una inscripción por facultad. Para poder competir es necesario haberse clasificado como equipo elegible en las competiciones regionales y elaborar y presentar a AIChE, en tiempo y forma, el documento **Engineering Documentation Package (EDP)**. Así mismo es necesario pagar una cuota de inscripción de 200 \$ por prototipo, para cubrir la eliminación de los productos químicos y de los residuos generados en el lugar de la competición.

### **2.1. Competición de pósteres**

El día de la competición debe presentarse un póster del Chem-E-Car junto con toda la documentación sobre el diseño y las pruebas realizadas con el vehículo, que deben estar disponibles para la inspección por parte de los jueces durante la sesión de pósters. Esta documentación debe incluir:

- a. Descripción del diseño del vehículo, esquemas y resultados de las pruebas.
- b. El documento **Engineering Documentation Package** completo descrito en las reglas de seguridad ([http://www.aiche.org/sites/default/files/docs/pages/chem-e-car\\_safety\\_rules\\_2014.pdf](http://www.aiche.org/sites/default/files/docs/pages/chem-e-car_safety_rules_2014.pdf)).
- c. Prueba de que el equipo competidor tiene todo el equipo de protección personal requerido.
- d. Evidencia, en su caso, de la creatividad en el diseño del sistema de propulsión y en la apariencia del vehículo.



La competición y la evaluación de los posters tendrán lugar antes de la competición de rendimiento del Chem-E-Car. Los miembros del equipo deben estar presentes durante la evaluación para responder a las preguntas de los jueces.

El equipo debe alcanzar una puntuación mínima de 70% en el concurso de pósteres para poder continuar en la Competición de Rendimiento del Chem-E-Car  $\hat{I}$ . Los pósteres serán juzgados de acuerdo a los siguientes criterios:

- a. Descripción de la fuente reacción química / fuente de alimentación (20%).
- b. Creatividad en el diseño y las características únicas del vehículo (20%).
- c. Características ambientales y de seguridad (40%).
- d. Calidad del póster y de las presentaciones de los miembros del equipo (20%).

Los ganadores del concurso de pósteres se darán a conocer al final de la competición de rendimiento.

## **2.2. Competición de rendimiento del Chem-E-Car**

### *2.2.1. Carga y distancia a recorrer*

A cada coche se le darán dos oportunidades para recorrer una distancia especificada transportando una cierta carga adicional y en un tiempo máximo de **2 minutos**. Se informará a cada equipo de la carga y de la distancia a recorrer una hora antes del inicio de la competición para ajustar el "combustible" o los reactivos químicos necesarios en la reacción química del coche. La distancia estará comprendida entre **15 y 30 m  $\pm$  0,005 m** y la carga a transportar entre **0 y 500 mL** de agua.

### *2.2.2. Área de recorrido y medición de la distancia a la línea de meta*

El objetivo final de la competición es detener el coche lo más cerca posible de la línea de meta transportando una carga específica, independientemente de la distancia recorrida dentro de un área delimitada. El área en forma de cuña, delimitada por cinta adhesiva, incluye la línea de salida y la línea de meta, claramente marcadas en un arco según se muestra en la Figura 1. El coche comenzará el recorrido haciendo coincidir su parte delantera con la línea de salida. La distancia a la línea de meta se medirá desde la parte delantera del coche.

Los vehículos que sobrepasen la línea de meta serán descalificados. Si el vehículo se sale completamente del área delimitada por las cintas adhesivas laterales (vehículo *fuera del área de recorrido*), se medirá la distancia desde el punto de salida por la cinta a la línea de meta con una penalización de 3,0 m que se añadirán al resultado final. Se define "*Fuera del área de recorrido*" cuando todo el vehículo se encuentra fuera de los límites de cinta que delimita el área. La cinta es considerada como parte del área.

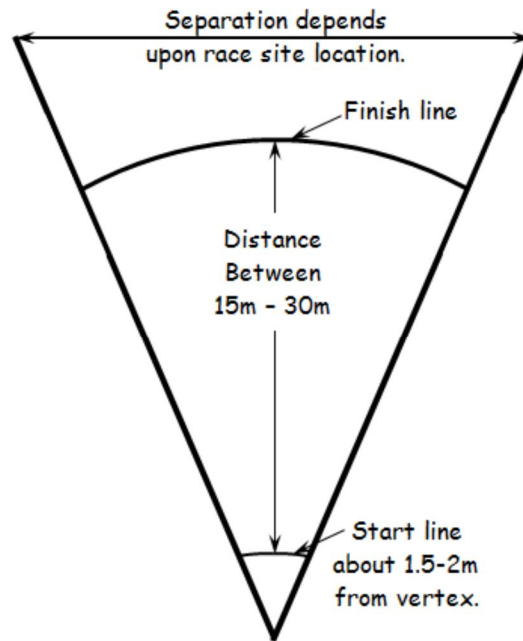


Figura 1. Área de recorrido del vehículo

#### 2.2.3. Desarrollo de las carreras

El juez de la competición avisará a cada equipo justo antes del inicio de su carrera. El equipo se presentará al público, indicando el nombre de la facultad y describiendo brevemente el sistema de propulsión.

Cada coche tendrá **dos intentos** para completar el recorrido. Es decir, se llevan a cabo dos rondas, con un intento en cada ronda. La mejor puntuación de estos dos intentos será la que se tendrá en cuenta para la valoración. Si el coche no se detiene en un tiempo máximo de **dos minutos de duración**, es descalificado en esa ronda de la competición. En el caso de que un equipo no se presente en la línea de salida, o que el vehículo no arranque, pasará a la línea de salida el siguiente equipo de la lista.

El orden de salida de los equipos en la primera ronda de la competición se determinará por sorteo al azar durante el concurso de pósteres. El orden en la segunda ronda será determinado por las posiciones conseguidas en la primera ronda, comenzando con el equipo que ha conseguido peor puntuación (distancia mayor hasta la línea de meta) y terminando con el equipo de mejor puntuación (distancia menor hasta la línea de meta).

#### 2.2.4. Consideraciones generales del sistema de propulsión del vehículo

- La única fuente de energía permitida para la propulsión y el frenado del coche es una reacción química. La distancia que recorra el vehículo debe estar basada en el cambio cuantificable y el control directo de la concentración de una especie química, que puede ser sólida, líquida o vapor. Se recomienda consultar la **base de datos de reacciones químicas (Actividad 1)** para elegir la reacción de

propulsión, si bien no es necesario elegir una de las recogidas en dicha base de datos.

- No están permitidos vehículos comerciales a no ser que se realicen sobre él grandes modificaciones sobre su funcionamiento.
- No está permitido utilizar baterías comerciales (por ejemplo, pilas AA) como fuente de alimentación. Las baterías comerciales solo están autorizadas para la instrumentación (por ejemplo, detectores, sensores).
- El vehículo debe ser autónomo y, por tanto, no puede ser controlado de forma remota. No está permitido empujar el vehículo para arrancarlo o usar un dispositivo mecánico de partida.
- Aunque se pueden utilizar sistemas de a bordo o controladores programables, éstos no deben controlar o medir la distancia recorrida. El programa debe ser cargado en el controlador / ordenador / procesador antes de la competición y no puede ser cambiado o conectado después de que comience la competición. No está permitida la comunicación con conexión de cable o inalámbrica con el ordenador / controlador de a bordo una vez que la competición ha comenzado y durante la competición.
- No está permitido aplicar ninguna fuerza mecánica a la rueda, engranajes, eje de transmisión, etc., o al suelo para desacelerar o detener el coche (no se puede utilizar ningún tipo de frenos).
- No está permitido utilizar ningún dispositivo temporizador mecánico o electrónico para detener la reacción química o detener el coche. Por ejemplo, no se permite una alimentación o un drenaje constante de un líquido para una célula de detección que emplea una reacción instantánea (ácido-base o precipitación).
- Están permitidos los motores de combustión interna que utilizan un combustible alternativo (por ejemplo, el biodiesel, etanol, etc.), siempre y cuando no emitan humo de combustión visible en el espacio de la competición y el combustible esté completamente sintetizado por los estudiantes (no se permite la mezcla de aditivos). Ver las **Reglas de Seguridad:**

[http://www.aiche.org/sites/default/files/docs/pages/chem-e-car\\_safety\\_rules\\_2014.pdf](http://www.aiche.org/sites/default/files/docs/pages/chem-e-car_safety_rules_2014.pdf).

#### *2.2.5. Tamaño del vehículo*

Todos los componentes del vehículo deben caber en una caja de dimensiones máximas de 40 cm x 30 cm x 20 cm. El vehículo puede ser desmontado para cumplir con este requisito.

#### *2.2.6. Recipiente para la carga de agua*

El coche debe llevar un recipiente que pueda contener hasta 500 mL de agua sin derramar. En la competición, sólo se suministra el agua, por lo que cada vehículo debe tener su propio recipiente.

### *2.2.7. Miembros del equipo*

Todos los miembros del equipo que participen en la Competición de la Conferencia Anual de Estudiantes deben ser miembros activos de AIChE.

Los estudiantes pueden solicitar ayuda a sus profesores y/o a estudiantes graduados. La facultad no puede ser generadora de ideas para el proyecto.

Los estudiantes que trabajen en el proyecto deben firmar una declaración indicando que han leído, entendido y acatado las reglas de la competición. Esta declaración debe ser incluida en el documento "Engineering Documentation Package" y debe estar disponible en el concurso de posters.

El tamaño mínimo del equipo es de **cinco participantes**.

Todos los miembros del equipo y el consejero de la facultad deben haber completado el curso de seguridad requerido (**Actividad 3**) como se indica en las Reglas de Seguridad de Chem-E-Car [http://www.aiche.org/sites/default/files/docs/pages/chem-e-car\\_safety\\_rules\\_2014.pdf](http://www.aiche.org/sites/default/files/docs/pages/chem-e-car_safety_rules_2014.pdf). Para ello se han desarrollado cuestionarios que sirvan de entrenamiento para que el estudiante pueda determinar el grado de conocimiento de las normas de seguridad de la competición (**Actividad 3**). Los cuestionarios se pueden realizar on-line en el siguiente enlace:  
<http://www.questionwritertracker.com/quiz/3813/2PHWYECR.html>.

## **3. Elaboración de los documentos necesarios**

### **3.1. "Engineering Documentation Package" (EDP)**

Este documento consta de las siguientes partes:

- Análisis de seguridad (JSA form): Este apartado incluye una breve descripción del vehículo indicando la reacción seleccionada para su propulsión y frenado (**Actividad 1**), las condiciones de operación (presión y temperatura), el equipo de protección personal necesario, la localización de los sistemas de seguridad y derrames, las actividades y vehículos no permitidos, los reactivos regulados, el "check list" de los principales riesgos del vehículo, de la fabricación y de la operación, información sobre los productos químicos utilizados y los procedimientos de operación segura.
- Diagrama de flujo del vehículo
- Base del diseño para la presión máxima de funcionamiento
- Base del diseño para la estimación del caudal másico
- Especificación de los equipos y tabla resumen: En este apartado se incluirán las especificaciones de los materiales utilizados en cada una de las partes del vehículo (**Actividad 4**).
- Certificación de la presión del recipiente/reactor
- Procedimientos de operación estándar

- Datos de pruebas
- Plano del área de experimentación del vehículo
- Sistema de gestión de modificaciones del vehículo
- Sistema de gestión para el uso y disposición de reactivos
- Fotos del vehículo y cómo aparecería en la línea de salida
- Hojas de datos de seguridad del material (MSDS)

En el siguiente enlace se puede obtener un ejemplo completo relleno de este documento: <http://www.aiche.org/sites/default/files/docs/pages/EDPModelDesign.pdf>. Así mismo, las instrucciones para completar el documento se encuentran recogidas en el Curso de Seguridad (**Actividad 3**) y en esta guía.

Para realizar los cálculos ingenieriles necesarios, los estudiantes podrán consultar el libro *ChemE. Calculations. Formulas. Definitions* disponible en el siguiente enlace: <http://www.aiche.org/sites/default/files/docs/overview-page/9865-14aichestudenthandbookfinalpdf.pdf>

### **3.2. Elaboración del póster**

El día de la competición los miembros del equipo deben presentar un póster que describa el método de propulsión del vehículo mediante una reacción química, las características especiales del coche y las características medioambientales y de seguridad.

Para la elaboración del póster se recomienda consultar el **ANEXO 1** de esta guía (*¿Cómo elaborar pósteres científicos?*).

### **3.3. Presupuesto**

El coste del vehículo y los productos químicos utilizados no debe superar los 2.000 dólares. El precio total **incluye** también el coste de cualquier equipo que haya sido donado y **no incluye** el trabajo de los talleres mecánicos universitarios y de otro personal ni el coste de la prueba de presión. Se debe indicar el método utilizado para calcular el coste de los equipos donados. El mismo coche no se puede reutilizar de año en año a no ser que se realicen cambios sustanciales y se indiquen en la presentación del póster. En el anexo 4 se ofrece una plantilla para el cálculo del presupuesto.

### **3.4. ¿Check list de requisitos medioambientales**

La reacción química involucrada deberá cumplir una serie de requisitos de seguridad y medioambientales de acuerdo a las Reglas de Seguridad de la competición recogidas en el siguiente enlace: [http://www.aiche.org/sites/default/files/docs/pages/chem-e-car\\_safety\\_rules\\_2014.pdf](http://www.aiche.org/sites/default/files/docs/pages/chem-e-car_safety_rules_2014.pdf).

#### 4. Procedimiento para construir el Chem-E-Car y participar en la competición

En este apartado se explica paso por paso las diferentes tareas que ha de realizar el equipo de trabajo para llegar a construir un Chem-E-Car que cumpla los requisitos necesarios para participar en la competición de AIChE.

##### 4.1. Formación del grupo

La primera tarea es formar un grupo de trabajo que cumpla las normas del concurso al respecto, apartado 10 del documento en pdf [Chem-E-Car Official Rules](http://www.aiche.org/sites/default/files/docs/pages/chem-e-car_official_rules_2014.pdf): [http://www.aiche.org/sites/default/files/docs/pages/chem-e-car\\_official\\_rules\\_2014.pdf](http://www.aiche.org/sites/default/files/docs/pages/chem-e-car_official_rules_2014.pdf) y que se explican en el apartado 2.2.7. de este documento.

Todos los miembros del equipo deben ser miembros activos de AIChE, por lo que aquellos que no sean miembros han de inscribirse en AIChE. Hacerse miembro de AIChE es gratuito para los estudiantes de grado.

Para ello hay que registrarse y elegir una contraseña de 7 caracteres en este enlace: <https://ecommerce.aiche.org/PersonifyEbusiness/Default.aspx?TabID=358&setskin=aiche> e ir completando las diferentes pantallas. Hay una serie de opciones en [membership options](#) que son servicios extra con un coste. No es necesario contratar ninguno para ser miembro de AIChE.

Cada miembro tiene que leer bien todas las reglas de la competición, las generales y las de seguridad, que se encuentran en estos enlaces:

- [http://www.aiche.org/sites/default/files/docs/pages/chem-e-car\\_safety\\_rules\\_2014.pdf](http://www.aiche.org/sites/default/files/docs/pages/chem-e-car_safety_rules_2014.pdf)
- [http://www.aiche.org/sites/default/files/docs/pages/chem-e-car\\_official\\_rules\\_2014.pdf](http://www.aiche.org/sites/default/files/docs/pages/chem-e-car_official_rules_2014.pdf)

Después hay que firmar una declaración indicando que han leído, entendido y acatado las reglas de la competición. No es necesario redactar nada, ya que esta declaración está en la página 4 del propio documento de reglas de competición, en: [http://www.aiche.org/sites/default/files/docs/pages/chem-e-car\\_official\\_rules\\_2014.pdf](http://www.aiche.org/sites/default/files/docs/pages/chem-e-car_official_rules_2014.pdf), se firma por todos los miembros, incluido el tutor. Si aún no se tiene un tutor, se puede buscar más adelante, cuando se tenga un poco definida la idea, si bien puede ser de gran ayuda buscarlo con anterioridad. Esta declaración debe ser incluida en el documento [Engineering Documentation Package](#) y debe estar disponible en el concurso de pósters.

El siguiente paso es aprender unas nociones básicas de seguridad, así como las reglas de seguridad de AIChE, mediante el curso on-line en el siguiente enlace: <http://www.aiche.org/community/students/chem-e-car-competition-rules/safety-training-test>, en el apartado [training](#) y superar el cuestionario relativo al curso, para lo que hace falta acertar el 80% de las preguntas del test, que está en el enlace: <http://www.questionwritetracker.com/quiz/3813/2PHWYECR.html>. Si bien se puede

intentar las veces que haga falta, es bueno prepararse autoevaluándose uno mismo mediante los cuestionarios que se han puesto a disposición de los estudiantes (**Actividad 3**).

Una vez terminada esta tarea, puede comprobarse el cumplimiento de las normas en el *õcheck listö* que incluye AICHe en el documento *õChem-E-Car Official Rulesö*.

#### **4.2. ¿Qué reacción propulsará el prototipo?**

Para construir un Chem-E-Car hay que elegir la reacción de propulsión, que ha de cumplir dos requisitos:

- La reacción deberá generar energía mecánica, térmica o eléctrica, que impulse el vehículo. Es decir, un aumento de presión o bien un flujo de electrones o calor que se transformarán en energía mecánica para la propulsión del vehículo.
- Todas las especies químicas involucradas cumplen los requisitos de la competición (ver punto 2 de la Guía metodológica de Seguridad, **Actividad 3**).

Para ello es recomendable consultar la base de datos de reacciones químicas (**Actividad 1**), que contiene algunos ejemplos de reacciones que cumplen ambos requisitos y las características más importantes de cada una de ellas. No es necesario elegir una de las recogidas en dicha base de datos.

Las reacciones de combustión son las opciones más sencillas, si bien, no representan una novedad importante, y esto ha de tenerse en cuenta. En el caso de elegir una combustión, es necesario que el combustible sea novedoso y que sea preparado por el equipo de trabajo, por ejemplo una clase de biofuel obtenido a partir de un residuo, etc.

Los motores de combustión han de cumplir una serie de normas, que vienen recogidas en el apartado 3.5 de la Guía metodológica de Seguridad.

En muchos casos, sobre todo cuando se emplean materias primas complejas, ya sea porque contienen un gran número de compuestos diferentes, como son los residuos, porque reaccionan en estado sólido, porque evolucionan con el tiempo o por cualquier otra razón, puede ser necesario llevar a cabo la reacción en el laboratorio para conocer con exactitud la conversión, la cinética, y cualesquiera otros datos de interés y optimizar, de este modo, las condiciones de reacción.

#### **4.3. Balances de materia y energía. Cálculos estequiométricos.**

Una vez elegida la reacción hay que conocer su termodinámica y su cinética, para lo que se puede consultar la base de datos de reacciones o realizar una búsqueda bibliográfica en las bases de datos de SciFinder Scholar o web of Science. Si la reacción es demasiado lenta, puede ser que no se genere suficiente energía mecánica en dos minutos como para impulsar el vehículo una distancia apreciable. Hay que comprobar no sólo que se genere energía, sino también que la energía generada en dos minutos sea suficientemente elevada. Por ello es necesario calcular la energía requerida para mover

el prototipo, con su máximo peso, la distancia máxima. Es cierto que aún no se tienen datos del peso del prototipo, de las pérdidas de energía debidas al rozamiento o a otras causas, que serían necesarios para realizar el cálculo, pero en esta fase inicial es suficiente con emplear un peso típico del vehículo y despreciar todas las pérdidas por rozamiento, ya que lo único que se pretende es saber si se podrá impulsar o no el vehículo con la reacción elegida.

Se comparará la energía que se estima necesaria para impulsar el prototipo con la generada en la reacción química correspondiente a un tiempo de reacción de dos minutos.

Los principios básicos necesarios para llevar los cálculos se recogen en la guía de bolsillo de cálculos ingenieriles de AIChE, disponible en el enlace: <http://www.aiche.org/sites/default/files/docs/overview-page/9865-14aichestudenthandbookfinalpdf.pdf>.

Hay que tener en cuenta en este cálculo de qué forma se suministrará la energía al prototipo.

#### *4.3.1. Prototipos impulsados por energía eléctrica.*

Si la forma de aprovechar la energía química liberada en la reacción es mediante la generación de una corriente de electrones, en una reacción redox, hay que calcular:

1. La intensidad de corriente por unidad de volumen de reacción. A partir de la ecuación cinética de la reacción y de la estequiometría de las dos semireacciones se puede obtener el caudal de electrones intercambiados en la reacción por unidad de volumen de reacción en función de la concentración de reactivos. Para ello se puede emplear la ecuación de Nerst.
2. La potencia generada por el circuito en función de la concentración o de la cantidad de reactivos, para lo que se ha de conocer la resistencia eléctrica del circuito o la diferencia de potencial o voltaje que debe generar el reactor o pila. El producto de dicho voltaje por la intensidad de corriente será la potencia generada.
3. El trabajo realizado en 2 minutos en función de la cantidad de reactivos, multiplicando la potencia por 120s.
4. ¿Es asumible la cantidad de reactivos necesaria para generar la energía requerida para impulsar el vehículo con su máxima carga la distancia máxima en dos minutos?

Para este tipo de cálculos resultará de gran ayuda la información teórico-práctica contenida en el enlace: <http://www.sapiensman.com/electrotecnia/index.htm>, así como el documento de conceptos básicos de reactores electrolíticos y células de combustible adjunto (**ANEXO 2**).



#### *4.3.2. Prototipos impulsados por energía mecánica.*

En este caso será un producto de reacción el que se acumule generando una presión que al ser liberada se transforma en energía cinética. Es necesario, pues, calcular el trabajo generado por la variación de presión o volumen en la reacción en dos minutos, y compararlo con la energía requerida, teniendo en cuenta el rendimiento del dispositivo que se empleará para tal transformación. Para ello serán de gran ayuda los apartados VI y VII del capítulo "Thermodynamics" del libro de bolsillo de cálculos ingenieriles de AIChE (<http://www.aiche.org/sites/default/files/docs/overview-page/9865-14aichestudenthandbookfinalpdf.pdf>).

#### *4.3.3. Prototipos impulsados por energía térmica.*

La energía térmica generada en la reacción ha de transformarse de alguna forma en energía mecánica. Se puede emplear una caldera que genere vapor que mueva una turbina o un generador para generar energía eléctrica o que impulse directamente el vehículo por la diferencia de presiones.

En primer lugar habrá que calcular la potencia térmica generada, que será el producto del calor de reacción por la ecuación cinética. A partir de ella se puede calcular el vapor generado mediante el correspondiente balance entálpico. El resto de los cálculos dependerá del diseño concebido para aprovechar la energía de dicho vapor, pero se puede calcular el trabajo generado por el vapor a partir de la variación de volumen o presión y, suponiendo un rendimiento conservador, compararlo con la energía requerida.

#### *4.3.4. Alternativas.*

En el caso en el que la energía generada por la reacción en dos minutos sea insuficiente se tienen tres alternativas:

- Catalizar la reacción
- Llevarla a cabo a mayor temperatura
- Elegir otra reacción más rápida

### **4.4. Diseño preliminar**

#### *4.4.1. Construcción del diagrama de flujo.*

Es necesario construir un diagrama de flujo del prototipo, que ha de contener suficiente información como para llevar a cabo el diseño preliminar de todos sus componentes. El objetivo de este diagrama es permitir una visión de conjunto rápida del prototipo.

El diagrama de flujo refleja el movimiento de materia que tiene lugar en el mismo y los principales componentes implicados en el proceso en forma de iconos, así como la interconexión entre ellos.

En cada componente se pueden especificar parámetros como la conversión alcanzada, las eficiencias o cualquier otro parámetro que caracterice su diseño.

La información contenida en el diagrama de flujo ha de ser suficiente para:

- Estimar preliminarmente el coste del equipo
- Calcular y comprobar los rendimientos
- Seleccionar el sistema de control más efectivo
- Establecer áreas de peligrosidad para diseñar el sistema de seguridad
- Justificar la operatividad de la instalación

El diagrama de flujo irá acompañado de una lista de equipos, en este caso, de componentes esenciales que recoja la función y las especificaciones principales de cada uno.

Tanto el diagrama de flujo como la lista de equipos serán documentos vivos, es decir, irán cambiando con el proyecto y ganando en exactitud y detalle hasta convertirse en los definitivos que se incluirán en el EDP del Chem-E-Car.

#### *4.4.2. Dimensionado del reactor.*

Todo prototipo tendrá un reactor, ya que es condición indispensable la existencia de una reacción química que permita la propulsión del prototipo y su parada basados en la variación de concentración de una o varias especies químicas. Sin embargo, el resto de los componentes del diseño dependerán sobremanera del prototipo. Por esta razón se dedica un capítulo de esta guía al reactor.

Para el diseño del reactor, será de gran ayuda recordar los conocimientos básicos de reactores, para lo que se recomienda estudiar el documento de conceptos básicos de reactores adjunto (**ANEXO 3**).

En primer lugar, es necesario elegir el tipo de reactor y calcular el volumen y dimensiones del mismo empleando para ello las ecuaciones de diseño del reactor ideal que se ajuste mejor al tipo de reactor seleccionado para llevar a cabo la reacción de propulsión. En la mayor parte de los casos será un reactor discontinuo. El capítulo *“Kinetics and Reactor Design”* del libro de bolsillo de cálculos ingenieriles de AIChE, (<http://www.aiche.org/sites/default/files/docs/overview-page/9865-14aichestudenthandbookfinalpdf.pdf>) contiene las nociones básicas para estimar el volumen del reactor. Para el cálculo del volumen del reactor se calcula la conversión que se tiene en la reacción en el tiempo de dos minutos, o mejor aún, en un tiempo inferior, para disponer de un margen de seguridad con respecto al tiempo máximo permitido en la competición. Dicho tiempo es el tiempo de residencia en el reactor discontinuo a partir del cual se calcula el volumen del reactor empleando la ecuación de diseño del reactor discontinuo.

Hay que tener en cuenta el volumen máximo del prototipo, ya que las dimensiones máximas permitidas son: 40 cm x 30 cm x 20 cm.

#### *4.4.3. Estimación del presupuesto.*

Es conveniente en esta etapa estimar, a partir de los datos de los componentes principales, el orden de magnitud del presupuesto del prototipo. Para ello, se puede contar con la información de los fabricantes de los componentes comerciales y con estimaciones a partir de componentes similares. El objetivo de esta primera estimación es tan solo tener una cierta seguridad de que el presupuesto del prototipo estará por debajo del límite establecido en las reglas de la competición.

#### *4.4.4. Estimación de la presión máxima de operación.*

La presión máxima de operación es la presión más alta dentro del depósito durante el funcionamiento normal. Para las etapas iniciales del diseño, esta presión puede estimarse mediante un balance de materia, a partir de la estequiometría de la reacción, la carga máxima del prototipo, y la distancia más larga que se contempla que pueda recorrer y las especificaciones del resto de los componentes, por ejemplo el motor, empleados para transformar dicha presión en movimiento. Se puede suponer, por ejemplo, que la reacción es completa, que no hay reacciones secundarias, etcétera. En esta etapa el objetivo de esta estimación es conocer si el equipo es a presión y, por lo tanto, si han de tenerse en cuenta las consideraciones especiales para equipos a presión en la demás etapas del diseño.

Para estandarizar su cálculo, se define la presión máxima de operación como la presión necesaria para impulsar el prototipo una distancia de 30.48 m, cuando va cargado con 500 g de agua. Sin embargo, la presión real puede ser diferente, por lo que habrá que medirla durante el funcionamiento del prototipo para comprobar que no supera el 90% de la estimada estequiométricamente.

En el caso en el que la presión calculada supere en 0.068 atm la presión atmosférica, se considera que se tiene un equipo a presión, por lo que se deberán cumplir las correspondientes restricciones, que se recogen en el documento "National Chem-E-Car Safety Rules" de AIChE

([http://www.aiche.org/sites/default/files/docs/pages/chem-e-car\\_safety\\_rules\\_2014.pdf](http://www.aiche.org/sites/default/files/docs/pages/chem-e-car_safety_rules_2014.pdf)) y se explican en la guía metodológica de cálculos de seguridad (**Actividad 3**).

#### *4.4.5. Válvula de alivio de emergencia.*

En el caso en el que se tenga un recipiente o un reactor a presión es necesario instalar en el punto más alto del equipo una válvula de alivio de seguridad. Para poder seleccionar la más adecuada y llevar a cabo los cálculos de sobrepresión pertinentes para poderla tarar correctamente conviene prepararse mediante alguna o algunas de las siguientes alternativas:

- Realizar el curso virtual gratuito que ofrece AIChE a través del enlace: <http://www.aiche.org/resources/chemeondemand/webinars/selected-pressure-relief-systems-heuristics>, que muestra el procedimiento de cálculo de la

sobrepresión y la elección de la válvula de alivio con las diferentes etapas, a través de un ejemplo.

- Leer la guía de John E. Edwards, titulada: *Emergency Relief System (ERS). Sizing Software. Methods & Practice*, que se incluye en la documentación de apoyo.
- Estudiar y emplear la guía de SACHÉ (Safety and Chemical Engineering Education), editada por Ron Darby y titulada: *Emergency Relief system Design for Single and Two-Phase Flow* que recomienda AIChE para este tipo de válvulas, pero que sólo está disponible para miembros de SACHÉ. Una alternativa a dicha guía es leer los artículos, que se incluyen en la documentación de apoyo:
  - Crowl D.A. y Tipler S.A. *Sizing Pressure Relief Devices*, CEP Magazine, October 2013, 68-76; que muestra las diferentes etapas del procedimiento para el dimensionamiento de la válvula de alivio.
  - Darby R. y Meiller P.R., *Select the Best Model for Two-Phase Relief Sizing*, CEP Magazine, May 2001, 56-64.

Es, además, obligatorio conocer y cumplir el Real Decreto 1388/2011, de 14 de octubre, sobre equipos a presión transportables, que está disponible en el enlace: <http://www.boe.es/boe/dias/2011/10/15/pdfs/BOE-A-2011-16174.pdf>

#### **4.5. Búsqueda de un tutor**

Si no se tiene un tutor aún, a partir de esta etapa es imprescindible que haya un tutor que guíe los trabajos del grupo. Por lo que, una vez que se haya decidido participar en el concurso de Chem-E-Car hay que buscar entre los profesores a un tutor que tiene que superar también el curso de seguridad y firmar la declaración incluida en la página 4 del documento de reglas del concurso.

#### **4.6. Diseño de detalle**

El objetivo de esta etapa es conseguir las especificaciones concretas de cada uno de los componentes del prototipo para seleccionar los modelos comerciales que mejor las cumplan o para diseñar y encargar al taller mecánico con los planos correspondientes, las piezas necesarias que no están disponibles en el mercado. En este último caso habrá que acordar con el taller mecánico el material o materiales de construcción de la pieza y dibujar los planos de planta y alzado con las cotas y tolerancias para que puedan mecanizar la pieza o las piezas.

La selección del material puede afectar considerablemente al presupuesto del prototipo, a su vida útil y a su funcionalidad. Por ello, para seleccionar el material se debe tener en cuenta las condiciones de presión y temperatura a las que estará expuesta la pieza, los compuestos químicos con los que entrará en contacto en esas condiciones. En general se debe seleccionar un material que sea resistente a los productos químicos presentes en el prototipo, o al menos los que puedan entrar en contacto con dicha pieza durante el

funcionamiento del equipo, en las condiciones más extremas de presión y temperatura que se puedan dar durante el funcionamiento del equipo.

Para la selección del material de los componentes se puede emplear la Guía de selección de materiales (**Actividad 4**).

#### **4.7. Presupuesto del prototipo**

El presupuesto total incluye:

- Piezas o componentes, ya sean comprados o donados
- Coste material de las piezas conformadas en el taller (no incluye el trabajo del taller)
- Productos químicos utilizados

Este presupuesto no debe superar los 2.000 dólares. Esto hay que tenerlo en cuenta desde el primer momento. En el caso en el que el coste de algún componente o pieza comercial sea muy elevado y dificulte cumplir este requisito, se recomienda acudir al taller mecánico, ya que de esta forma, sólo haría falta incluir el coste del material. Otra forma de reducir el presupuesto es estudiar la posibilidad de emplear productos químicos de menor pureza, ya que el coste de reactivos aumenta a menudo exponencialmente con la pureza.

Para estimar el coste de los equipos o componentes donados existen varias opciones, como, por ejemplo:

- A partir del valor comercial del componente, actualizado, que se reduciría al aplicar la amortización debida al tiempo previo de uso del equipo. Para seleccionar el periodo de amortización es necesario consultar las tablas de amortización (Real Decreto 1777/2004, de 30 de julio).
- A partir del valor material del componente. Multiplicando su masa por el precio en el mercado del material de fabricación.

Se pueden emplear otros métodos, pero siempre se debe indicar el método utilizado.

Para calcular el presupuesto se puede utilizar la plantilla incluida en el **ANEXO 4**. El presupuesto es un documento vivo, es decir, cambia con cada modificación del prototipo, por lo que deberá ser revisado cada vez que se decida modificar el vehículo para asegurarse de que corresponde a la última versión del prototipo.

#### **4.8. Aprobación del tutor**

El tutor revisará todo el diseño para aprobar la construcción del prototipo según el diseño realizado o si éste ha de corregirse antes de ser aprobado.

#### **4.9. Cálculo de la presión máxima de operación**

Con las especificaciones del fabricante de los diferentes componentes implicados en el movimiento del prototipo es posible realizar un cálculo más exacto de la presión máxima de operación, por lo que se revisará la estimación anterior.

#### **4.10. Selección definitiva de la válvula de alivio y cálculo del caudal másico de gas aliviado**

En el caso en el que la presión supere en 0.068 atm a la atmosférica y al revisar la presión máxima de operación ésta haya cambiado significativamente, hay que comprobar que la selección y dimensionado de la válvula de alivio es correcto. La válvula de alivio debe estar tarada a una presión inferior a 1.1 veces la presión máxima de operación.

A partir de la cinética de la reacción y de la presión a la que esté tarada la válvula de alivio se puede calcular el caudal másico liberado por la válvula de alivio en el caso en el que ésta tuviese que actuar. Este caudal de gas ha de ser inferior al máximo que es capaz de liberar la válvula, dato que da el fabricante, que, a su vez debe ser superior a la velocidad de generación del gas en la reacción.

En el caso en el que no se disponga de la cinética de reacción, se puede llevar a cabo un ensayo en el laboratorio para determinar cuánto tiempo tarda en completarse la reacción, o bien, cuál es la conversión de la misma en un determinado tiempo y calcular estequiométricamente el gas generado para la máxima cantidad de reactivos que pueden cargarse en el prototipo.

#### **4.11. Certificación de la presión máxima de operación con agua**

Los componentes que trabajen a presión deben certificarse para asegurar que son aptos y seguros para contener los fluidos a presión según un protocolo que se recoge en el apéndice A de las reglas de seguridad de AIChE (National Chem-E-Car<sup>®</sup> Safety Rules). Los componentes comerciales seguramente ya están certificados para trabajar a determinada presión y figura la presión máxima (MAWP) en las especificaciones, sobre el propio equipo o en el manual. Si el equipo o componente tiene menos de 5 años y no presenta evidencias de daño o corrosión, la documentación del fabricante con respecto a MAWP es suficiente. En caso contrario hay que realizar la prueba o encargarla al fabricante o a una empresa especializada. Para ello se realizan pruebas en el laboratorio en las que se llena el componente con agua y se aumenta la presión mediante el bombeo del agua hasta que duplica la presión de operación o hasta que alcanza 15 veces la MAWP del fabricante, según se conozca ésta o no, y se mantiene durante 30 minutos. Luego se deja que disminuya la presión hasta la de operación y se mantiene durante un cierto tiempo para comprobar la estanqueidad del componente y medir su deformación. Si en cualquiera de las presiones probadas se observaran fugas, el componente no sería apto para trabajar a presión, por lo que debería ser modificado.

#### **4.12. Construcción del prototipo**

Una vez adquiridos los diferentes componentes y certificados aquellos que trabajen a presión, se ensamblan según lo diseñado. Hay que tener en cuenta que no se permiten fugas en el prototipo, por lo que todas las piezas han de estar diseñadas para encajar perfectamente de forma directa o mediante juntas de sellado. Al seleccionar el material de las juntas ha de considerarse la resistencia química de las mismas a los compuestos que estén presentes en el prototipo durante su funcionamiento.

#### **4.13. Pruebas en laboratorio.**

Es imposible a priori calcular con exactitud la función matemática que relacione la distancia recorrida con la cantidad de reactivo o reactivos alimentados al prototipo, ya que se desconocen los múltiples factores de rozamiento involucrados y otras variables que pueden afectar al aprovechamiento de la energía generada en la reacción. Además, la presión máxima de operación que se ha estimado debe comprobarse experimentalmente.

Por ello se realizan pruebas de laboratorio con el prototipo construido para obtener, empíricamente, la presión máxima de operación y la relación entre cantidad de reactivo y distancia recorrida. Esta relación es la base del control del prototipo. Estas pruebas permiten también conocer la presión de operación en función de la cantidad de reactivo, detectar fallos en el diseño o construcción del vehículo, detectar fugas, determinar cualitativamente al menos, el nivel de ruido, etc.

Cualquier cambio en los componentes del prototipo o en la carga que transporta afectará a la relación entre la distancia recorrida y la cantidad de reactivo, por eso si el prototipo sufre modificaciones han de repetirse las pruebas. Además, el rozamiento con el suelo puede ser un factor importante que ha de tenerse en cuenta, por lo que sería bueno conocer el tipo de suelo en el que se llevará a cabo la competición y hacer pruebas sobre una superficie similar, ya que no está permitido probar el vehículo el día de la competición.

Se han de llevar a cabo pruebas con diferentes cantidades de reactivos y con distintas cargas (pesos de agua) entre 0 y 500 mL. Si la presión atmosférica puede tener influencia significativa, también sería bueno llevar a cabo las pruebas a diferentes presiones atmosféricas. Se registrará en cada ensayo, al menos, la distancia, el tiempo empleado en recorrer dicha distancia y la presión alcanzada.

El lugar donde se lleven a cabo las pruebas ha de ser un laboratorio de la universidad equipado con todos los elementos de seguridad necesarios, ha de tener al menos lavajos, extintor y botiquín. Hay que conseguir o elaborar un plano del laboratorio donde se lleven a cabo los ensayos, con el fin de incluirlo en el EDP. El plano deberá indicar todos los elementos de seguridad del laboratorio.

#### 4.14. Hoja del cálculo de la cantidad de reactivos

Es muy útil elaborar una hoja de cálculo con la función empírica que relacione la cantidad de reactivo o reactivos con la distancia a recorrer y la carga del vehículo, ya que estos dos datos se darán a conocer sólo una hora antes de la competición.

#### 4.15. Elaboración del EDP con los datos definitivos

Se tienen ya todos los datos necesarios para elaborar el EDP del prototipo.

El **JSA** incluye una breve descripción del vehículo y las condiciones de operación (presión y temperatura), seguidas de un análisis de seguridad y una lista de comprobación de los requisitos de seguridad que ha de cumplir el prototipo y los miembros del grupo. Para rellenarlo es conveniente releer y tener a mano el curso de seguridad de AIChE, que explica detalladamente cada apartado del JSA del EDP y que está disponible en el enlace: <http://www.aiche.org/community/students/chem-e-car-competition-rules/safety-training-test>.

El **diagrama de flujo** del vehículo ha de estar completo, en formato y reflejar fielmente la última versión del prototipo. Cada pieza o componente estará identificado con un código, que será el que se emplee para referirse a dicho componente en el resto del EDP, incluido el JSA. Los códigos identificadores son alfanuméricos; constan de una letra que designa el tipo de componente (por ejemplo: T para torre, V para recipiente, etc.) seguido de un número.

El apartado **Base del diseño para la presión máxima de funcionamiento** se refiere a las premisas, los datos y las suposiciones de las que se ha partido para calcular la presión máxima de operación. También hay que incluir el resultado de dicho cálculo y las concentraciones de reactivo necesarias, cuando el prototipo recorre la máxima distancia 33.05 m con 500 mL de agua como carga.

El apartado **Base del diseño para la estimación del caudal másico** se refiere a los cálculos estequiométricos realizados para calcular el caudal de gas que liberaría la válvula de alivio en el caso en el que tuviese que actuar. Este caudal de gas ha de ser inferior al máximo que es capaz de liberar la válvula, dato que da el fabricante, que, a su vez debe ser superior a la velocidad de generación del gas en la reacción.

Las **Especificación de los equipos y tabla resumen** se rellena a partir del diagrama de flujo, y los datos aportados por el diseño de detalle y por el fabricante de cada pieza. La tabla ha de incluir todas las piezas. Se puede emplear la plantilla de tabla resumen adjuntada (**ANEXO 5**).

La **certificación de la presión del recipiente/reactor** es necesaria en recipientes que operen a presión. Si son comerciales y están certificados por el fabricante es suficiente con aportar la información que da el fabricante al respecto. En el caso contrario, hay que elaborar un certificado con la información de los test de presión que se han llevado a cabo y que firmará el tutor. Es recomendable seguir el ejemplo que se muestra en el



apartado 6 del ejemplo de EDP (pg.29) Disponible en el enlace: <http://www.aiche.org/sites/default/files/docs/pages/EDPModelDesign.pdf>.

En el apartado: **Procedimientos de operación estándar** se describe el protocolo de empleo del prototipo de forma esquemática. En realidad, si las etapas o pasos necesarias para poner en marcha el prototipo están bien enumeradas y en orden en el apartado **Safe Operating Procedures** del JSA, basta con copiarlas.

El informe de resultados de las pruebas de laboratorio realizadas para encontrar la relación entre carga de reactivos y distancia recorrida se incluye en el apartado: **Datos de pruebas**.

En el apartado **Plano del área de experimentación del vehículo** se ha de incluir un plano del lugar donde se hayan llevado a cabo los experimentos. Este plano ha de indicar la ubicación de todos los elementos y sistemas de seguridad del lugar como: extintores, duchas de seguridad, lavaojos, alarmas de incendio, kits de protección de salpicaduras o derrames, botiquín de primeros auxilios, etc. Si es posible, conviene buscar un plano de seguridad, por ejemplo, los planos que indican las vías de evacuación del edificio, seleccionar la zona correspondiente al laboratorio y completarla con aquellos elementos de seguridad y otros detalles que falten.

Es inevitable que se realicen mejoras en el prototipo a medida que se dispone de más datos o como consecuencia de los resultados obtenidos en las diferentes pruebas de laboratorio. Estos cambios o mejoras afectan no sólo al vehículo, sino a toda la documentación asociada al mismo, que podría quedar desfasada. Por ello es necesario idear un sistema de gestión de los cambios, que se describirá en la sección **Sistema de gestión de modificaciones del vehículo** y que entrará en funcionamiento una vez que el EDP sea revisado por el tutor. Este sistema puede ser un protocolo o un conjunto de medidas adoptadas con el fin de reflejar las modificaciones en la documentación y evitar el empleo de versiones desfasadas de la misma, además de asegurar el cumplimiento de todas las normas de seguridad tras las modificaciones. Ha de indicarse quién o quiénes revisarán los cambios para aprobarlos, lo que puede variar según el tipo de cambio e implicar la aprobación del tutor. Todo el grupo ha de estar al corriente de cada modificación, por lo que se establecerá el mecanismo necesario para ello. También debe indicarse cómo se registrarán las modificaciones realizadas de forma que se pueda seguir la historia de modificaciones.

Para asegurar que se cumplen las normas de seguridad en cuanto al manejo de compuestos hay que diseñar un **Sistema de gestión para el uso y disposición de productos químicos**. Que incluye una lista de los reactivos, los productos, los residuos generados, dónde y cómo se almacenarán, como se gestionarán los residuos de la experimentación y del funcionamiento del prototipo durante los ensayos en el laboratorio y durante la competición.

Se incluyen también fotos del vehículo que han de mostrar el aspecto del mismo actualizado, es decir tal y como aparecerá en la línea de salida. Por lo tanto, las fotos se

actualizarán cada vez que se lleve a cabo una modificación que afecte al aspecto del prototipo.

Por último se incluyen las hojas de seguridad de todos los compuestos químicos empleados o involucrados en el proceso: reactivos, productos, intermedios de reacción, disolventes, etc. Todo compuesto químico involucrado debe tener su hoja de seguridad incluida en este apartado. Las hojas de seguridad se pueden conseguir fácilmente del distribuidor o del fabricante del producto químico. Para los intermedios de reacción se puede buscar en la web de un gran proveedor de reactivos químicos, como Sigma Aldrich la hoja de seguridad de dicho compuesto y descargarla.

#### **4.16. Elaboración del póster**

Para elaborar el poster se aconseja consultar la guía de elaboración de pósteres científicos.

#### **4.17. Inscripción en el concurso**


Una vez preparados para el concurso, se puede llevar a cabo la inscripción, en primer lugar, para el concurso regional, los pasos y las fechas tope para cada uno, están recogidos en forma de check-list en el documento de reglas de seguridad de AIChE: [http://www.aiche.org/sites/default/files/docs/pages/chem-e-car\\_official\\_rules\\_2014.pdf](http://www.aiche.org/sites/default/files/docs/pages/chem-e-car_official_rules_2014.pdf)

## **ANEXO 1.**

**Seminario ¿Cómo elaborar pósteres científicos?**

UCM **"AICHE ChemE Car Competition"**

# ¿Cómo elaborar pósteres científicos?



¿Cómo elaborar pósteres científicos? 1

UCM

## CONTENIDO

- INTRODUCCIÓN
- ESTRUCTURA
- DISEÑO
- ERRORES FRECUENTES
- EJEMPLOS
- BIBLIOGRAFÍA

¿Cómo elaborar pósteres científicos? 2

UCM

## CONTENIDO

- INTRODUCCIÓN
- ESTRUCTURA
- DISEÑO
- ERRORES FRECUENTES
- EJEMPLOS
- BIBLIOGRAFÍA

¿Cómo elaborar pósteres científicos? 3

UCM

## INTRODUCCIÓN

Los resultados de los trabajos científicos pueden darse a conocer de muchas maneras:

- Artículos científicos
- Libros
- Reuniones científicas
- Congresos



¿Cómo elaborar pósteres científicos? 4

UCM

## INTRODUCCIÓN

Los resultados de los trabajos científicos en congresos pueden darse a conocer mediante:

- Conferencias
- Mesas redondas
- Comunicaciones orales
- Pósteres



¿Cómo elaborar pósteres científicos? 5

UCM

## INTRODUCCIÓN

### ¿Qué es un póster?

"Cartel que se fija en la pared sin finalidad publicitaria o habiendo perdido ese carácter" (RAE)

### ¿Qué es un póster científico?

"Tipo de comunicación gráfica que posibilita la transmisión concisa, clara y permanente de su contenido, sin la fugacidad de la comunicación oral" (E. Guardiola, 2010)

¿Cómo elaborar pósteres científicos? 6

UCM

INGENIERÍA QUÍMICA

INTRODUCCIÓN

Características de un póster científico

- Puede ser analizado con detenimiento por los asistentes a una velocidad que se ajuste a sus capacidades e intereses.
- Posibilita la transmisión de un mensaje por parte del autor y su captación por parte de los demás.
- La posibilidad de entablar una comunicación directa con el autor o autores del póster permite el comentario de su contenido, la discusión ordenada, sosegada y tranquila, el intercambio de opiniones, etc.
- Se pueden considerar otras cuestiones relacionadas con el tema que se expone, intercambiar experiencias entre profesionales, clarificar conceptos, participar en nuevos conocimientos, etc.

¿Cómo elaborar pósteres científicos? 7

UCM

INGENIERÍA QUÍMICA

INTRODUCCIÓN

Ventajas de un póster científico

- Los asistentes al congreso pueden leer, analizar y estudiar el contenido del póster cuando quieran y durante tanto tiempo como deseen.
- Permite establecer un contacto directo con los autores (sobre todo durante el tiempo en que el autor, siguiendo las indicaciones de los organizadores del congreso, debe permanecer junto al póster).
- La representación gráfica puede facilitar la comprensión del contenido de lo que se quiere comunicar: «una imagen vale más que mil palabras».
- Es más fácil recordar o retener imágenes que recordar o retener una presentación oral («las palabras se las lleva el viento»).
- Si está bien diseñado, permite realizar la presentación de un trabajo de forma rigurosa pero, al mismo tiempo, amena, agradable y atractiva.

¿Cómo elaborar pósteres científicos? 8

UCM

INGENIERÍA QUÍMICA

INTRODUCCIÓN

Inconvenientes de un póster científico

- El receptor tiene que acercarse al póster y debe tener una actitud activa una vez está frente al póster: ha de leer, interpretar tablas y figuras, entablar relación con el autor, etc.
- En algunos congresos, el lugar donde se colocan los pósteres hace que este esfuerzo sea aún mayor.
- En ocasiones, la exposición de los pósteres y la presencia de los autores junto a ellos tienen lugar en horarios «especiales».
- En congresos en que se presentan muchos pósteres, el tiempo que cada póster está expuesto puede ser demasiado corto.

¿Cómo elaborar pósteres científicos? 9

UCM

INGENIERÍA QUÍMICA

CONTENIDO

- INTRODUCCIÓN
- ESTRUCTURA
- DISEÑO
- ERRORES FRECUENTES
- EJEMPLOS
- BIBLIOGRAFÍA

¿Cómo elaborar pósteres científicos? 10

UCM

INGENIERÍA QUÍMICA

ESTRUCTURA

1. CONTENIDO

¿Qué queremos comunicar?

2. PRESENTACIÓN

¿Cómo vamos a estructurar la presentación?

RESUMEN

¿Cómo elaborar pósteres científicos? 11

UCM

INGENIERÍA QUÍMICA

ESTRUCTURA

Título

Autores

Filiación

Introducción-Objetivos

Metodología

Resultados

Conclusiones

Referencias

Agradecimientos

¿Cómo elaborar pósteres científicos? 12

INGENIERIA QUÍMICA

ESTRUCTURA

**Título**

- Debe identificar y reflejar con exactitud el tema del trabajo.
- Debe ser específico y conciso.
- Debe evitarse la utilización de abreviaturas, siglas, acrónimos y el empleo de jerga y de palabras o expresiones superfluas.

**Autores**

- Deben ser los mismos que firman el resumen.
- Tienen que haber participado activamente en él y asumir la responsabilidad del contenido intelectual del trabajo.

**Filiación**

- Nombre del departamento y del centro donde trabajan los autores, ciudad y país.
- También puede incluir la dirección postal completa y la dirección de correo electrónico.

**EFFECT OF THE QUALITY OF THE DILUTION WATER ON DEPOSIT FORMATION IN PAPERMAKING**  
M.C. Monte, M. Sánchez, C. Negro and A. Blanco  
Cellulose and Paper Research Group  
Chemical Engineering Department, Complutense University of Madrid  
Avda. Complutense s/n 28040 Madrid, Spain  
e-mail: cnegro@quim.ucm.es; Tels: +34 91 394 42 42; Fax: +34 91 394 42 43

INGENIERIA QUÍMICA

ESTRUCTURA

**Introducción-Objetivos**

- Debe ser corta. Sirve para familiarizar al lector con el tema.
- Los aspectos que debe contemplar son:
  - Antecedentes, revisión (muy corta) del tema.
  - Importancia teórica o práctica del tema.
  - Hipótesis.
  - Objetivos del trabajo.
  - Definiciones (si se considera oportuno).

**OBJECTIVE**

- Study of the interactions produced by diluting a filtrate from the screw press of the second-loop in a deinking line from a mill using 100% recycled fiber from the point of view of deposit formation (microstickies and secondary stickies) using the deposition tester developed by the Cellulose and Paper Group of the Chemical Engineering Department at Complutense University of Madrid.

¿Cómo elaborar pósteres científicos? 14

INGENIERIA QUÍMICA

ESTRUCTURA

**Metodología (Materiales y métodos)**

- Este apartado ha de permitir al lector evaluar la forma en que se llevó a cabo el trabajo.
- Debe describir el diseño del estudio, cómo se llevó a cabo, si tuvo distintas fases, qué variables se consideraron, cómo se analizaron los datos (análisis estadístico, si lo hubo), etc.

**EXPERIMENTAL PROCEDURE**

¿Cómo elaborar pósteres científicos? 15

INGENIERIA QUÍMICA

ESTRUCTURA

**Resultados**

- Incluye un resumen de los resultados, una vez analizados.
- Hay que seleccionar los datos más relevantes y que estén más relacionados con el objetivo del estudio.
- Hay que evitar textos demasiado largos, con demasiados datos. La utilización de tablas y figuras en este apartado es muy útil.

**RESULTS**

¿Cómo elaborar pósteres científicos? 16

INGENIERIA QUÍMICA

ESTRUCTURA

**Conclusiones**

- Este apartado no debe olvidarse nunca. También puede incluirse una pequeña discusión de los resultados, una interpretación de éstos, recomendaciones para futuros trabajos, sugerencias, etc.
- Hay que ser muy objetivo en el momento de redactar tanto la discusión como las conclusiones.

**CONCLUSIONS**

- There are not important differences between the use of fresh water or process water for dilution. However, when there is a shock of around 40% in the cationic demand of the dilution waters, independently of their source, there is an important increase in deposit formation. Therefore, in these cases, the dilution must be done in two steps.
- Results show that when diluting the process water with less contaminated water, in terms of anionic trash and detrimental substances, there are less deposits, as expected.

¿Cómo elaborar pósteres científicos? 17

INGENIERIA QUÍMICA

ESTRUCTURA

**Referencias bibliográficas**

- No es obligatorio incluir referencias bibliográficas en un póster y se puede prescindir de este apartado.
- Si se decide incluir referencias, se seleccionarán las más importantes e imprescindibles en relación con el tema.

**Agradecimientos**

- No es obligatorio, pero se debe incluir para mencionar a aquellas personas que han participado en el trabajo pero que no pueden considerarse autores, a organizaciones, empresas o sociedades que han financiado el trabajo o que han contribuido de alguna forma, etc.

**ACKNOWLEDGEMENTS**

The authors wish to acknowledge the financial support to the Community of Madrid for the Project PROLIPAFEL II-CM (S-2009AMB-1480); to the Ministry of Science and Innovation for the Project CTM2008-06886-C02-01; and to the European Union for the AQUAFIT Project (Ref. 211554).

¿Cómo elaborar pósteres científicos? 18

**ESTRUCTURA**

El póster es un medio muy adecuado para la utilización de recursos gráficos. Por este motivo, son pocos los pósteres en que sólo se utiliza texto.

El justo equilibrio entre texto e imágenes contribuye en gran parte al “éxito” del póster.

¿Cómo elaborar pósteres científicos? 19

**CONTENIDO**

- INTRODUCCIÓN
- ESTRUCTURA
- DISEÑO
- ERRORES FRECUENTES
- EJEMPLOS
- BIBLIOGRAFÍA

¿Cómo elaborar pósteres científicos? 20

**DISEÑO (Sugerencias)**

**Tipo y tamaño de letra**

- No deben utilizarse solamente letras en mayúscula. Cuando leemos, identificamos formas; si todas las letras se parecen, cuesta más distinguirlas.
- Utilizar tipos de letra “sencillos”, por ejemplo Arial o Helvética, y no más de dos tipos distintos en todo el póster.
- Debe cuidarse la justificación del texto. Hay que tener en cuenta que si se justifica el texto a ambos lados pueden quedar grandes espacios en blanco entre palabras.
- No se aconseja utilizar el subrayado (las palabras subrayadas se ven peor desde lejos). Para resaltar o remarcar el texto es mejor utilizar la cursiva o la negrita.

¿Cómo elaborar pósteres científicos? 21

**DISEÑO (Sugerencias)**

**Tipo y tamaño de letra**

- **Título:** tiene que poder leerse bien desde lejos (desde 1,5 m a 2 m de distancia).
  - En negrita.
  - Tamaño: al menos 36 puntos.
  - Que guarde proporción con el resto del texto.
- **Autores, filiación y encabezamientos de los apartados:** de tamaño menor que el título.
  - En negrita.
  - Tamaño: 30 puntos (o más).
- **Encabezamientos de niveles inferiores de los apartados:** de tamaño menor que los de los apartados.
  - En negrita.
  - Tamaño: 24 puntos (o más).
- **Texto:**
  - No utilizar la negrita.
  - Tamaño: 20 puntos (o más).

¿Cómo elaborar pósteres científicos? 22

**DISEÑO (Sugerencias)**

**Letra de 72 puntos, negrita**

**Letra de 48 puntos, negrita**

**Letra de 36 puntos, negrita**

Letra de 24 puntos

¿Cómo elaborar pósteres científicos? 23

**DISEÑO (Sugerencias)**

Este texto tiene mayúsculas y minúsculas.

ESTE TEXTO SÓLO TIENE MAYÚSCULAS.

Éste se lee desde lejos (36 puntos).

ÉSTE NO SE LEE MUY BIEN, CUENTA MÁS LEERLO FÁCILMENTE DESDE LEJOS (18 PUNTOS).

Y ÉSTE PRÁCTICAMENTE NO SE VE (¡NI SE LEE!) DESDE LEJOS (12 PUNTOS).

¿Cómo elaborar pósteres científicos? 24

**UCM**  
INGENIERÍA QUÍMICA

## DISEÑO (Sugerencias)

### Contenido

- Han de predominar las figuras y las tablas. Algunos autores sugieren que al menos el 50% del póster debe destinarse a representaciones gráficas.
- Los diversos apartados deben separarse mediante espacios en blanco, cuidando especialmente tanto que no haya demasiados blancos como que el contenido no esté demasiado abigarrado.
- Toda aquella información que no sea importante o relevante no debe incluirse en el póster.
- Hay que cuidar especialmente la redacción, así como la ortografía.
- Tenemos que vigilar que toda la información incluida en el póster sea consistente (que los datos, cifras, etc., coincidan en el texto, las tablas y las figuras).

¿Cómo elaborar pósteres científicos? 25

**UCM**  
INGENIERÍA QUÍMICA

## DISEÑO (Sugerencias)

### Otros aspectos

#### MEDIDAS

- Hay que tener en cuenta las medidas que la organización del congreso indica y en ningún caso debemos sobrepasarlas (sí puede ser de tamaño menor).

#### ESBOZO Y CONFECCIÓN DEL PÓSTER

- De una sola pieza: por ejemplo, con un programa de ordenador y después lo imprimimos al tamaño que marca el congreso (en un plotter).
- En varias piezas, que montaremos nosotros cuando lo colguemos en el congreso.

¿Cómo elaborar pósteres científicos? 26

**UCM**  
INGENIERÍA QUÍMICA

## DISEÑO (Sugerencias)

### Otros aspectos

#### COLORES, TIPOS DE FIGURAS, GRÁFICOS

- Es importante tener en cuenta los colores que utilizaremos. El texto, las tablas y las figuras deben contrastar y no confundirse con el fondo.
- Ni colores demasiado vivos ni un póster demasiado "aburrido". En general, debe utilizarse el cambio de color para enfatizar algún aspecto, establecer diferencias o añadir interés a lo que se presenta.
- Hay que procurar que las tablas, las figuras y otros elementos gráficos guarden armonía en cuanto a tamaño, tipografía y colores, entre ellos y con el resto del póster (título, texto, etc.).
- El "buen gusto" debe primar.

¿Cómo elaborar pósteres científicos? 27

**UCM**  
INGENIERÍA QUÍMICA

## CONTENIDO

- INTRODUCCIÓN
- ESTRUCTURA
- DISEÑO
- ERRORES FRECUENTES
- EJEMPLOS
- BIBLIOGRAFÍA

¿Cómo elaborar pósteres científicos? 28

**UCM**  
INGENIERÍA QUÍMICA

## ERRORES FRECUENTES

- Texto difícil de leer (letra demasiado pequeña, borrosa desde lejos...)
- Póster demasiado "lleno" (demasiada información, mucho texto, muchas tablas y figuras)
- Mala organización del contenido del póster
- Efectos que distraen la atención

¿Cómo elaborar pósteres científicos? 29

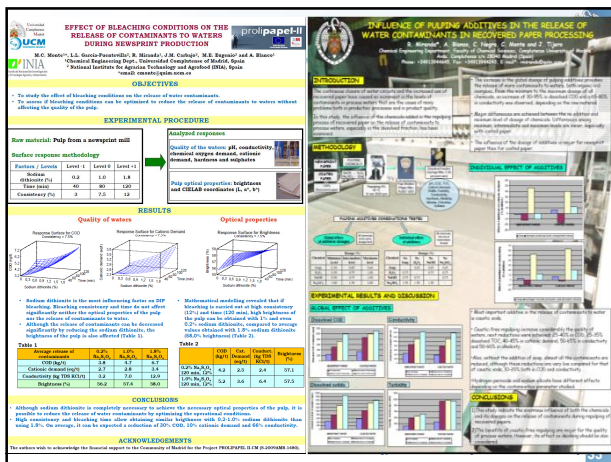
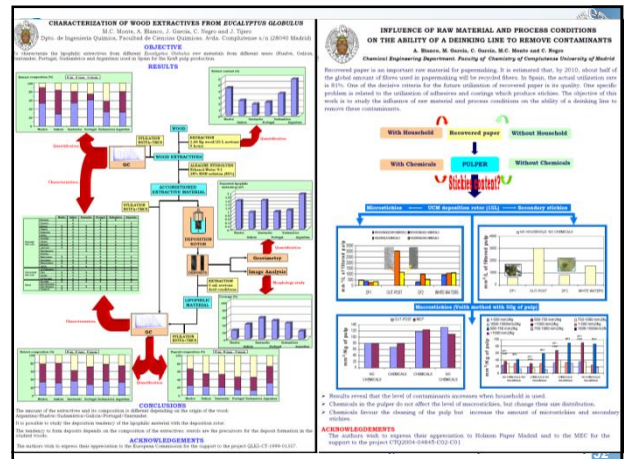
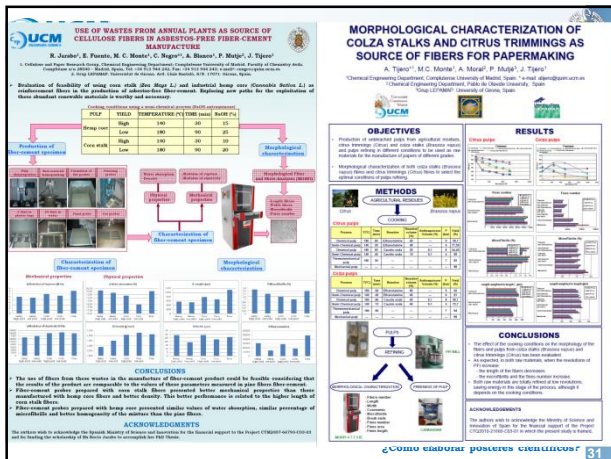
**UCM**  
INGENIERÍA QUÍMICA

## CONTENIDO

- INTRODUCCIÓN
- ESTRUCTURA
- DISEÑO
- ERRORES FRECUENTES
- EJEMPLOS
- BIBLIOGRAFÍA

¿Cómo elaborar pósteres científicos? 30





**CONTENIDO**

- INTRODUCCIÓN
- ESTRUCTURA
- DISEÑO
- ERRORES FRECUENTES
- EJEMPLOS
- BIBLIOGRAFÍA

¿Cómo elaborar pósters científicos? 34

**BIBLIOGRAFÍA**

- Guardiola E. "El póster científico". En: Serés E., Rosich L., Bosch F. "Presentaciones orales en biomedicina. Aspectos a tener en cuenta para mejorar la comunicación. Cuadernos de la Fundación Dr Antonio Esteve nº20. Barcelona. Fundación Dr Antoni Esteve, 2010, 85-102
- Bravo Ramos J.L "Elaboración de pósters para congresos". 2007
- [http://www.posterpresentations.com/html/free\\_poster\\_templates.html](http://www.posterpresentations.com/html/free_poster_templates.html)
- <http://www.posteression.com/templates.php>

¿Cómo elaborar pósters científicos? 35

## **ANEXO 2.**

### **Conceptos básicos de reactores electrolíticos y células de combustible**

UCM INGENIERIA QUÍMICA

## INTRODUCCIÓN A LA ELECTROQUÍMICA INDUSTRIAL

Conceptos básicos de reactores electrolíticos y células de combustible

UCM INGENIERIA QUÍMICA

## REPRESENTACIÓN ESQUEMÁTICA DE UN SISTEMA ELECTROLÍTICO

Conceptos básicos de reactores electrolíticos y células de combustible

UCM INGENIERIA QUÍMICA

## EL REACTOR/CELDA ELECTROQUÍMICA/A COMPONENTES BÁSICOS

### ELECTRODOS

### DIAFRAGMAS

### MEMBRANAS

### PROMOTORES DE TURBULENCIA

### CUERPO DE LA CELDA

### JUNTAS

### DISTRIBUIDORES DE FLUJO

### RECTIFICADORES

Conceptos básicos de reactores electrolíticos y células de combustible

UCM INGENIERIA QUÍMICA

## EL REACTOR ELECTROQUÍMICO COMPONENTES BÁSICOS

### ELECTRODOS

- Materiales conductores de la electricidad.
- Se produce la transferencia electrónica con la disolución.
- Electrodo de trabajo + Contraelectrodo.
- Cátodo (negativo): Tiene lugar la reducción.  
 $O + ne^- \rightarrow R$
- Ánodo (positivo): Tiene lugar la oxidación.  
 $R - ne^- \rightarrow O$

Conceptos básicos de reactores electrolíticos y células de combustible

UCM INGENIERIA QUÍMICA

## EL REACTOR ELECTROQUÍMICO COMPONENTES BÁSICOS

### DIAFRAGMAS

- Materiales que evitan el contacto entre el anólito y el católito.
- Se utilizan cuando:
  - ✓ el reactivo o el producto pueden oxidarse/reducirse en el contraelectrodo
  - ✓ se generan gases en los electrodos
  - ✓ se pueden producir mezclas explosivas
- **Propiedades:** baja resistencia eléctrica, alta estabilidad física y química, bajo coeficiente de difusión del anólito al católito y viceversa, resistencia a la obstrucción de poros, bajo coste.
- **Tipos:**
  - ✓ No permselectivos: materiales porosos que impiden el paso de las especies iónicas y no iónicas (vidrio, PP, PVC, Teflón, nylon, caucho, mezclas polímero + cerámica...).
  - ✓ Permselectivos: membranas de intercambio iónico

Conceptos básicos de reactores electrolíticos y células de combustible

UCM INGENIERIA QUÍMICA

## EL REACTOR ELECTROQUÍMICO COMPONENTES BÁSICOS

### MEMBRANAS (1/2)

- Permiten el paso de los iones de una carga determinada.
  - ✓ Catiónicas: Transportan cationes, impidiendo el paso de aniones.
  - ✓ Aniónicas: Transportan aniones, impidiendo el paso de cationes.
- Constan de estructuras poliméricas en forma de lámina, con grupos intercambiadores de iones anclados.
  - ✓ Intercambio catiónico: Grupos sulfónicos  $-SO_3H$  y Grupos carboxílicos  $-COOH$ .
  - ✓ Intercambio aniónico: Grupos amonio cuaternarios  $-NR_3^+$ .
- Se refuerzan con materiales soporte para aumentar sus propiedades mecánicas (PVC o fibra de vidrio).

Conceptos básicos de reactores electrolíticos y células de combustible

UCM INGENIERIA QUÍMICA

EL REACTOR ELECTROQUÍMICO  
COMPONENTES BÁSICOS

## MEMBRANAS (2/2)

- Espesor: 0,1 – 1 mm.
- Resistencia eléctrica:  $1,5 - 20 \Omega \cdot \text{cm}^2$ .
- Sus propiedades pueden variarse regulando:
  - ✓ La porosidad del polímero base.
  - ✓ La capacidad de intercambio iónico.
  - ✓ El material soporte.
  - ✓ Su espesor.

Conceptos básicos de reactores  
electrolíticos y células de combustible

UCM INGENIERIA QUÍMICA

EL REACTOR ELECTROQUÍMICO  
COMPONENTES BÁSICOS

## PROMOTORES DE TURBULENCIA

- Formados por redes de materiales poliméricos o bolas de vidrio.
- Se localizan entre los electrodos ó entre estos y el diafragma (electrosíntesis) o entre las membranas (electrodiálisis).
- El electrolito fluye a través de ellos.
- Aumentan la turbulencia y favorecen la transferencia de materia disolución-electrodo-disolución (electrosíntesis) y disolución-membrana-disolución (electrodiálisis).
- Están diseñados para lograr una distribución uniforme del flujo del electrolito a lo largo del área del electrodo o membrana.

Conceptos básicos de reactores  
electrolíticos y células de combustible

UCM INGENIERIA QUÍMICA

EL REACTOR ELECTROQUÍMICO  
COMPONENTES BÁSICOS

## CUERPO DE LA CELDA

- Engloba en su interior todos los componentes de la celda.
- Construido con materiales resistentes a la corrosión y aislantes (PVC, PP, PE, Teflón..).

## JUNTAS

- Evitan fugas del electrolito en las celdas.
- Evitan la mezcla del anolito y catolito (electrosíntesis).
- Evitan la mezcla de corrientes en los compartimentos de concentrado y diluido (electrodiálisis).
- Alta estabilidad química y resistencia mecánica (silicona, PVC, ...)

Conceptos básicos de reactores  
electrolíticos y células de combustible

UCM INGENIERIA QUÍMICA

EL REACTOR ELECTROQUÍMICO  
COMPONENTES BÁSICOS

## DISTRIBUIDORES DE FLUJO

- Distribuyen uniformemente el flujo a la entrada y a la salida de los compartimentos electródicos (electrosíntesis) o intermembránicos (electrodiálisis).
- Evitan la formación de zonas muertas en los canales de flujo de las celdas.
- Consisten en ranuras realizadas en los marcos que portan los promotores de turbulencia o en pequeñas mallas de materiales poliméricos situadas a la entrada y salida del electrolito.

Conceptos básicos de reactores  
electrolíticos y células de combustible

UCM INGENIERIA QUÍMICA

EL REACTOR ELECTROQUÍMICO:  
COMPONENTES BÁSICOS

## RECTIFICADORES

- El suministro de energía se realiza a través de una fuente de alimentación de corriente continua.
- Los rectificadores transforman la corriente alterna en continua.
- El equipo de alimentación de corriente consta de:
  - ✓ Un transformador: Transforma la corriente eléctrica de alto voltaje al voltaje específico del proceso.
  - ✓ Un rectificador: Transforma la corriente alterna en continua.

Conceptos básicos de reactores  
electrolíticos y células de combustible

UCM INGENIERIA QUÍMICA

FUNDAMENTOS DE LA ELECTROLISIS Y  
CARACTERIZACIÓN DE ELECTROLIZADORES

Conceptos básicos de reactores  
electrolíticos y células de combustible

**INGENIERÍA ELECTROQUÍMICA: CONCEPTOS Y UNIDADES BÁSICAS**

**Potencial normal de electrodo,  $E^\circ$ , V**

- Diferencia de potencial de la celda construida con un electrodo de dicho elemento y el electrodo estándar de  $H_2$  (1 M, 1 atm y 298 K)
- Característico del electrodo. Tendencia semirreacción

**Potencial de electrodo, V**

- Trabajo para desplazar 1 C entre los dos extremos de la interfase electrodo-electrolito

**Voltaje,  $E_c$ , V**

- Diferencia de potencial entre los dos electrodos extremos. Función de la densidad de corriente (I/Se)

**Intensidad,  $I$ , A.** Caudal de electrones.  $1A = 1C/s$

**Densidad de corriente,  $I/S_c$ , A/m<sup>2</sup>**

- Interesa elevada: 50 – 4000 A/cm<sup>2</sup>.
- Afecta a: velocidad proceso, la eficacia de la corriente, el consumo específico de energía.

**Resistencia eléctrica,  $R$ , ohmios,  $\Omega$**   $1\Omega = 1V/1A$ ;  $V=IR$

**Resistividad,  $\rho$ ,  $\Omega \cdot cm$ .**  $\rho = RS/l$ ,  $l$  = longitud.  $\rho = f(\text{composición, } T^\circ)$

**Conductividad,  $k$ , Siemens/cm** ( $1S = 1\Omega^{-1}$ ):  $S/cm$ .  $k = 1/\rho$

Conceptos básicos de reactores electrolíticos y células de combustible

**INGENIERÍA ELECTROQUÍMICA: CONCEPTOS Y UNIDADES BÁSICAS**

**Producción (g)**

$$m = M \cdot I \cdot t \cdot E_c / (n \cdot F) \text{ Ley de Faraday}$$

- $m$  (g);  $M$  (g/mol);  $n$  (eq/mol);  $I$  (A);  $F = 96500$  C/eq;  $t$ (s);  $E_c$ : eficacia de la corriente (tanto por uno)

**Eficacia de la corriente ó rendimiento de la corriente,  $E_c$ , %**

- $E_c = 100 \cdot m \cdot n \cdot F / (M \cdot I)$
- fracción de la corriente que, siguiendo la ley de Faraday, se utiliza en la reacción deseada
- De ella dependen los costes y el tamaño de la planta
- cuidadosa selección de variables:
  - material electrolítico, densidad de corriente, concentración y tipo de electrolito, potencial de electrodo, tipo de diafragma o membrana, tipo de celda y geometría, contraelectrodo, transferencia de materia disolución-electrodo y disolución-membrana

Conceptos básicos de reactores electrolíticos y células de combustible

**INGENIERÍA ELECTROQUÍMICA: CONCEPTOS Y UNIDADES BÁSICAS**

**Rendimiento espacio-tiempo,  $R_{to_{et}}$ , Kg/h.m<sup>3</sup> ó m<sup>3</sup>/h.m<sup>3</sup>**

- $R_{to_{et}} = \text{Producción celda} / (t \cdot V_{celda})$

**Productividad específica, Kg/h.m<sup>2</sup> ó m<sup>3</sup>/h.m<sup>2</sup>**

- $Productiv. Esp. = \text{Producción} / (t \cdot (S_e \text{ ó } S_m))$

**Área electroactiva por unidad de volumen, m<sup>2</sup>/m<sup>3</sup>**

- Área electroactiva =  $S_e / V_{celda}$

Conceptos básicos de reactores electrolíticos y células de combustible

**INGENIERÍA ELECTROQUÍMICA: CONCEPTOS Y UNIDADES BÁSICAS**

**Consumo específico de energía ó consumo energético unitario, Kwh/Kg ó Kwh/m<sup>3</sup>**

- $CEU = 26,8 \cdot n \cdot E_c / E_c \cdot M$
- Parte Importante del coste

**Rendimiento de la energía, Kg/Kwh ó m<sup>3</sup>/Kwh**

- 1/CEU

**Rendimiento energético, %**

- $100 \cdot kwh_{teórico} / kwh_{real}$

**Tiempo de residencia,  $t_r$ , s**

$Prensa: t_r = l_{electrodo} \cdot S_{conducción electrolito} / Q_{electrolito}$

Conceptos básicos de reactores electrolíticos y células de combustible

**COMPONENTES DEL VOLTAGE DE CELDA**

**Sobrepotenciales      Caída óhmica**

$$E_T = E_e^a + E_e^c + \eta_a + \eta_c + IR_s + IR_d + IR_c$$

$E_e^a$  y  $E_e^c$ : potenciales de equilibrio del ánodo y del cátodo.  
 $\eta_a$  y  $\eta_c$ : sobrepotenciales del cátodo y del ánodo.  
 $I$ : intensidad de la corriente.  
 $R_s$ : resistencia eléctrica de las disoluciones.  
 $R_d$ : resistencia eléctrica del diafragma o de la membrana.  
 $R_c$ : resistencia del circuito eléctrico externa.

Conceptos básicos de reactores electrolíticos y células de combustible

**COMPONENTES DEL VOLTAGE DE CELDA: VOLTAGE DE EQUILIBRIO**

$A + n e^- \rightleftharpoons B$

**En el equilibrio: (Ecuación de Nerst)**

$$I = 0, I_{int} = |I_{ox}| = |I_{red}|$$

$$E_e = E_e^\circ - (RT/(nF)) \ln(C_B/C_A)$$

**Es necesario aplicar una diferencia de potencial superior al de equilibrio para obtener el producto. → sobrepotenciales de activación y concentración**

Conceptos básicos de reactores electrolíticos y células de combustible



**SOBREPOTENCIALES**

**Exceso de potencial respecto al de equilibrio que es necesario para superar la barrera energética de la reacción.**

- **Sobrepotencial de activación ( $\eta_a$ ):**
  - Relacionado con la transferencia electrónica.
    - Selección electrodos con altas densidades de corriente de intercambio
    - Dopaje de electrodos con catalizador
- **Sobrepotencial de concentración ( $\eta_c$ ):**
  - Relacionado con la transferencia de materia.
  - Se opera en condiciones en que éste es pequeño.

*Conceptos básicos de reactores electrolíticos y células de combustible*

**SOBREPOTENCIALES**

**SOBREPOTENCIAL DE ACTIVACIÓN La doble capa eléctrica.**

**Modelo de Stern**

$F_d$  Fuerza difusional.  
 $F_{er}$  Fuerza electrostática de repulsión.  
 $F_{ea}$  Fuerza electrostática de atracción.  
 $\psi_0$  Potencial en la superficie.  
 $\psi_r$  Potencial de Stern: caída de potencial entre el plano de Stern y la disolución.  
 $\zeta$  Potencial zeta.  
 $\kappa$  Inversa de la longitud de Debye  
 $\delta$  Espesor de la capa de Stern

$\eta_a = (RT/anF) \cdot (\ln[I/I_{int}])$   
**Ley de Tafel**  
*Conceptos básicos de reactores electrolíticos y células de combustible*

**SOBREPOTENCIALES**

**SOBREPOTENCIAL DE ACTIVACIÓN**

$\eta_a = (RT/anF) \cdot (\ln[I/I_{int}])$   
**Ley de Tafel**

**La doble capa eléctrica**

*electrolíticos y células de combustible*

**LA TRANSFERENCIA ELECTRÓNICA: CINÉTICA**

$\alpha = \text{coeficiente de transferencia} \approx 0,5$   
 $\alpha$  y  $\eta$  experimentalmente

$\log I_{ox} = \log I_{int} + \alpha n F \eta / (2,3 RT)$   
 $\log I_{red} = \log I_{int} - (1 - \alpha) n F \eta / (2,3 RT)$   
 Tafel (1905) Erdey-Gruz y Volmer (1930)

**INGENIERÍA DE PROCESOS Tema III 2010-2011**

**SOBREPOTENCIALES**

**SOBREPOTENCIAL DE CONCENTRACIÓN**

Mecanismos de transferencia de materia

**DIFUSIÓN**

**CONVECCIÓN**

**Electrodiálisis**

**MIGRACIÓN**

Fuerzas impulsoras

Gradiente de concentración  
Leyes de Fick

Fuerzas mecánicas externas (bombeo)

Campo eléctrico

**Electrosíntesis**

*Conceptos básicos de reactores electrolíticos y células de combustible*

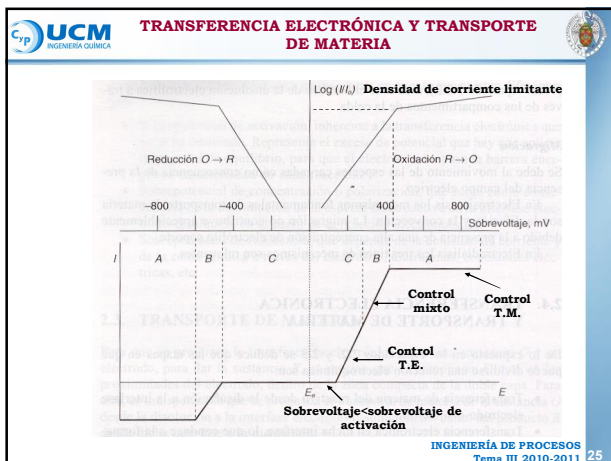
**TRANSFERENCIA ELECTRÓNICA Y TRANSPORTE DE MATERIA**

**Transferencia de materia**

**Transferencia electrónica**

**Transferencia de materia**

**INGENIERÍA DE PROCESOS Tema III 2010-2011**



**TRANSFERENCIA ELECTRÓNICA Y TRANSPORTE DE MATERIA**

**No se debe superar la densidad de corriente limitante:**

- El exceso de corriente se emplea en reacciones indeseadas  $\rightarrow \downarrow E_c$ .
- Probables cambios en composición en interfase electrodo-disolución:
  - $\downarrow$  Selectividad
  - $\uparrow$  Corrosión electrodos
  - $\downarrow$  Vida membranas

$\uparrow$  Transporte materia (convección)  $\rightarrow \uparrow I$  limitante:

- Agitación
- Flujo forzado electrolito
- Borboteo gas inerte en interfase electrodo-disolución

Conceptos básicos de reactores electrolíticos y células de combustible 26

**OPTIMIZACIÓN DE LOS PROCESOS ELECTROLÍTICOS**

$\uparrow$  Consumo Energía y  $\uparrow$  n° celdas

- Se necesitan diseños de celda sencillos y de bajo coste.
- Se deben utilizar altas densidades de corriente para minimizar el inmovilizado.
- Los componentes de las celdas deben ser resistentes, versátiles y tener largas vidas operativas.
- Evitar las reacciones secundarias:
  - $\uparrow$  Consumo Energía.
  - Impurifican producto.
  - Corrosión.
- Selección electrodos.
- Células con mínimo consumo energético.

Conceptos básicos de reactores electrolíticos y células de combustible 27

**DESCOMPOSICIÓN ELECTROQUÍMICA DEL AGUA**

Conceptos básicos de reactores electrolíticos y células de combustible 28

**ELECTROLISIS DEL AGUA**

- $< 2\%$  de la producción total  $H_2$
- Elevada pureza: hidrogenación de grasas

$$H_2O \rightleftharpoons H_2 + 1/2 O_2$$

$$\Delta H = 68,3 \text{ Kcal/mol} = \underbrace{\Delta G (56,69 \text{ Kcal/mol})}_{\text{Trabajo}} + \underbrace{T \Delta S (25^\circ C)}_{\text{Calor}}$$

$E = (\Delta G / nF) + \text{Sobretensiones}$

1,23V	0,38V	{ Burbujas gas Interfase electródica Diafragma       }

$\uparrow T^a, \uparrow I/S, \uparrow C_{\text{electrolito}} \rightarrow \downarrow d, \text{Ánodo Ni Cátodo Fe}$

Operación 1,8 - 2,2V

Conceptos básicos de reactores electrolíticos y células de combustible 29

**ELECTROLISIS DEL AGUA**

**ELECTROLIZADORES**

**Electrolito en disolución (circulante: composición,  $T^a$ )**

- **Célula, tanque o electrodos monopolares.**
  - Células con ánodo y cátodo rodeados del diafragma conectadas en paralelo en un tanque común.
  - $H_2$  de elevada pureza.
- **Filtro-prensa o bipolares.**
  - Electrodos en serie doble cara: ánodo/cátodo. Diafragma entre electrodos. Conexión en electrodos terminales.
  - Más caros, conexión más sencilla, menos espacio, P superior: posibilidad obtención gases comprimidos, mayor  $T^a$  y Rto. energético.  $\rightarrow$  más utilizados.

**Electrolito polímero sólido (I. Espacial, pilas  $H_2$ )**

- **Electrolito:** lámina de polímero alta conductividad iónica.
- **Cátodo:** lámina de Pt. **Ánodo:** lámina aleación catalizador.
- **Alimentación:** Sólo agua destilada.
- $P > 200 \text{ atm}$ ,  $T^a$  hasta  $150^\circ C \rightarrow E_t < 1.8 \text{ V}$ .  $I/S$  hasta  $3 \text{ A/cm}^2$ .

**ELECTROLISIS DEL AGUA**

**ELECTROLIZADORES de a**

Fabricante	Tipo	Potencial de trabajo (V/célula)	Densidad de corriente (A/cm <sup>2</sup> )	Temperatura (°C)	Presión (atm)	Eficiencia energética (%) <sup>a</sup>
Bamag	Filtro-prensa	1,92	0,25	80	1	67
Comico	Monopolar	2,10	0,08	60	1	58
De Nora	Filtro-prensa	1,85	0,30	70	1	69
Electrolyzer	Monopolar	2,04	0,21	70	1	64
Lurgi	Filtro-prensa	1,84	0,21	95	30	71
Norsk-Hydro	Filtro-prensa	1,87	0,15	80	1	70
Teledyne	Filtro-prensa	1,84	0,43	82	6	71

<sup>a</sup> Referida al poder calorífico inferior del H<sub>2</sub>.

Conceptos básicos de reactores electrolíticos y células de combustible

**OTROS PROCESOS ELECTROQUÍMICOS**

Conceptos básicos de reactores electrolíticos y células de combustible

**APLICACIONES TRADICIONALES**

**Producción de cloro-sosa**  
**Desinfección: NaClO**  
**Fabricación de flúor**  
**Producción de metales:**  
 • Cu, Al, Cr, Zn, Ni, Ti, ...  
**Electrodeposición de metales**  
**Industria papelera y textil: clorato sódico**  
**Peróxido de hidrógeno**  
**Permanganato y dicromato potásico**

Ánodo :  $2\text{Cl}^- \rightarrow \text{Cl}_2 + 2\text{e}^-$   
 Cátodo:  $2\text{H}_2\text{O} + 2\text{e}^- \rightarrow \text{H}_2 + 2\text{OH}^-$   
 Reacción :  $\text{Cl}_2 + 2\text{OH}^- \rightarrow \text{Cl}^- + \text{ClO}^- + \text{H}_2\text{O}$

Conceptos básicos de reactores electrolíticos y células de combustible

**APLICACIONES TRADICIONALES**

**Fabricación de flúor:**  
 • Electrolito: KF + HF  
 • Oxidación:  $2\text{F}^- \rightarrow \text{F}_2 + 2\text{e}^-$   
 • Reacción:  $2\text{HF} \rightarrow \text{F}_2 + \text{H}_2$

**Fabricación de H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>:**

Ánodo insoluble de Titanio recubierto (TSIA)  
 Cátodo de carbón vítreo

Reacción:  $2\text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{O}_2 + 2\text{H}^+ + 2\text{e}^-$  (anode) and  $\text{O}_2 + 2\text{H}^+ + 2\text{e}^- \rightarrow \text{H}_2\text{O}_2$  (cathode)

**APLICACIONES AVANZADAS**

**Fibras: MONSANTO electrosíntesis de adiponitrilo, intermedio en la fabricación de nylon**  
**Química fina**  
**Industria farmacéutica**  
**Producción de ozono**  
**Aplicaciones medioambientales**  
**Células de combustible**

Conceptos básicos de reactores electrolíticos y células de combustible

**APLICACIONES AVANZADAS**

**Producción de ozono**

**A partir de aire**

Reacción:  $3\text{O}_2 \rightarrow 2\text{O}_3$

- Arco eléctrico 6.000-20.000 V
- En el arco, del 1% al 10% del O<sub>2</sub> se convierte en O<sub>3</sub>
- El ozono es muy inestable → debe generarse in situ

Conceptos básicos de reactores electrolíticos y células de combustible



**APLICACIONES AVANZADAS**

### Producción de ozono: a partir de agua

Reacción:  $3\text{H}_2\text{O} \rightarrow 2\text{H}_2 + \text{O}_3$

- Arco eléctrico 6.000-20.000 V
- En el arco, del 1% al 10% del  $\text{O}_2$  se convierte en  $\text{O}_3$
- El ozono es muy inestable  $\rightarrow$  debe generarse *in situ*

*Conceptos básicos de reactores electrolíticos y células de combustible*

**OPTIMIZACIÓN DE LOS PROCESOS ELECTROLÍTICOS**

↑ Consumo Energía y ↑ n° celdas

- Se necesitan diseños de celda sencillos y de bajo coste.
- Se deben utilizar altas densidades de corriente para minimizar el inmovilizado.
- Los componentes de las celdas deben ser resistentes, versátiles y tener largas vidas operativas.
- Evitar las reacciones secundarias:
  - ↑ Consumo Energía.
  - Impurifican producto.
  - Corrosión.
- Selección electrodos.
- Células con mínimo consumo energético.

*Conceptos básicos de reactores electrolíticos y células de combustible*

**BIBLIOGRAFÍA**

David Newton and George Solt. "Water use and reuse". IChemE. Reino Unido, 1994.

Jose Ramón Ochoa. "Electrosíntesis y electrodialisis: fundamentos, aplicaciones tecnológicas y tendencias". Mc Graw Hill. Madrid, 1996.

C.L. Mantell. "Ingeniería electro-química". Ed. Reverté. Barcelona, 1980

Derek Pletcher and Frank C. Walsh. "Industrial electrochemistry". Blackie Academic & professional. UK, 1993.

Angel Vian. "Introducción a la química industrial". Ed. Reverté. Barcelona, 1994.

*Conceptos básicos de reactores electrolíticos y células de combustible*

**CÉLULAS DE COMBUSTIBLE**

*INGENIERÍA DE PROCESOS Tema III 2010-2011*

**CÉLULAS DE COMBUSTIBLE**

### NO ES UNA PILA NI UNA BATERÍA

Célula de combustible	Pila o batería
Electrodos catalíticos	Electrodos reactivos
Alimentación de combustible continua	Cantidad limitada de reactivo
Reactivos fluidos	Reactivos sólidos
Eliminación continua del producto	Acumulación de los productos

*Conceptos básicos de reactores electrolíticos y células de combustible*

**CÉLULAS DE COMBUSTIBLE**

### Célula de membrana intercambiadora de protones

Membrana aislada eléctricamente humidificada

Hidrógeno

Aire

Ánodo: Pt pulverizado sobre grafito

Cátodo: Catalizador + electrodo

Fuel Cell Stack = Pila de células de combustible >45 celdas en serie o paralelo

Ánodo:  $\text{H}_2 \rightarrow 2\text{H}^+ + 2\text{e}^-$

Cátodo:  $\text{O}_2 + 4\text{H}^+ + 4\text{e}^- \rightarrow 2\text{H}_2\text{O}$

Moléculas fuente de  $\text{H}_2$

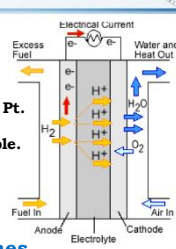
Célula:  $\text{H}_2 (\text{g}) + \frac{1}{2}\text{O}_2 (\text{g}) \rightarrow \text{H}_2\text{O}$

*INGENIERÍA DE PROCESOS Tema III 2010-2011*

**TIPOS DE CÉLULAS DE COMBUSTIBLE**

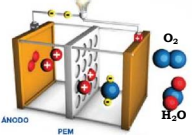
### De ácido fosfórico (PAFC)

- Electrolito:  $\text{H}_3\text{PO}_4$  impregnado en una matriz.
- Trabaja a 150-200 °C, porque a menores temperaturas el ácido es poco conductor y el CO puede contaminar el electrocatalizador de Pt.
- Genera vapor de agua apto para cogeneración.
- Puede usar hidrógeno impuro como combustible. Tolerancia a una concentración de 1,5% de CO.
- Desventajas:
  - Uso de Pt
  - Menor eficacia: Celda: 55%, Sistema: 40%
  - Mayor tamaño y peso → Aplicaciones: > 10 MW



### Membranas de intercambio de protones (PEM FC)

- Operan a baja temperatura: 70-200 °C
- Electrolito: polímero orgánico sólido de ácido poliperfluorosulfónico.
- Menor corrosión
- Aplicación: de 0,1 a 500 kW
- Eficiencia energética: Celda: 50-70% Sistema: 30-50%



43

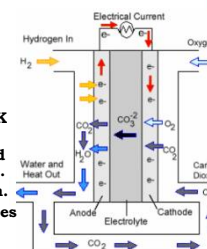
**TIPOS DE CÉLULAS DE COMBUSTIBLE**

### Alcalinas

- Electrolito: disol. de KOH impregnada en una matriz sólida.
- $T^a < 80\text{ °C}$
- Aplicaciones: de 10 a 100 kW
- Eficiencia: Celda: 60-70% Sistema: 62%

### Carbonato fundido (MCFC) (comercializándose)

- Electrolito: mezcla de  $\text{CO}_3^{2-}$  de Li, Na y/o K fundidos e impregnados en una matriz.
- $T = 600-730\text{ °C}$  para alcanzar conductividad suficiente del electrolito (líquido a esa  $T^a$ ).
- El vapor de agua se usa para cogeneración.
- No necesita catalizadores de metales nobles
- Desventajas: Corrosión
- Aplicaciones: 100 MW
- Eficiencia energética: Celda: 55%, Sistema: 47%



$$\text{H}_2(\text{g}) + \text{CO}_3^{2-} \rightarrow \text{H}_2\text{O}(\text{g}) + \text{CO}_2 + 2\text{e}^-$$

$$\frac{1}{2}\text{O}_2(\text{g}) + \text{CO}_2(\text{g}) + 2\text{e}^- \rightarrow \text{CO}_3^{2-}$$

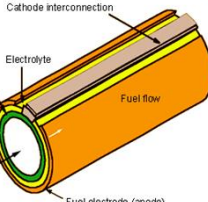
$$\text{H}_2(\text{g}) + \frac{1}{2}\text{O}_2(\text{g}) + \text{CO}_2(\text{g}) \rightarrow \text{H}_2\text{O}(\text{g}) + \text{CO}(\text{g})$$

44

**TIPOS DE CÉLULAS DE COMBUSTIBLE**

### Óxido sólido (SOFC)

- En desarrollo y comercializándose
- Electrolito de Óxido Cerámico o ZrO
- $T^a$  800-1.000 °C.
- Aplicaciones: > 100 kW
- Eficiencia: Celda: 60-65% Sistema: 55-60%



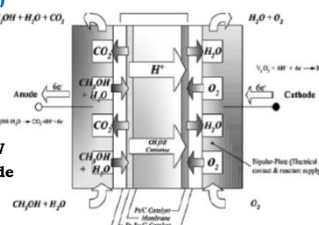
Conceptos básicos de reactores electrolíticos y células de combustible

45

**TIPOS DE CÉLULAS DE COMBUSTIBLE**

### Metanol directo (DMFC) (comercializándose)

- Electrolito: membrana polimérica.
- El catalizador del ánodo extrae el  $\text{H}_2$  del metanol.
- Trabaja a 90-120 °C.
- Aplicaciones: hasta 100 kW
- Baja eficiencia energética de la celda: 20-30 %



$$\text{CH}_3\text{OH}(\text{aq}) + \text{H}_2\text{O}(\text{l}) \rightarrow \text{CO}_2(\text{g}) + 6\text{H}^+(\text{aq}) + 6\text{e}^-$$

$$6\text{H}^+(\text{aq}) + 6\text{e}^- + 3/2\text{O}_2(\text{g}) \rightarrow 3\text{H}_2\text{O}(\text{l})$$

$$\text{CH}_3\text{OH}(\text{aq}) + 3/2\text{O}_2(\text{g}) \rightarrow \text{CO}_2(\text{g}) + 2\text{H}_2\text{O}(\text{g})$$

Conceptos básicos de reactores electrolíticos y células de combustible

46

**TIPOS DE CÉLULAS DE COMBUSTIBLE**

### Comparación y aplicaciones

Tipo	Alta Temperatura		Baja Temperatura		
	Carbonatos Fundidos	Electrolito Sólido	Ácido Fosfórico	Membrana Polimérica	Alcalina
Abreviatura	MCFC	SOFC	PAFC	PEMFC	AFC
Electrolito	Carbonato	Cerámico	$\text{H}_3\text{PO}_4$	Polímero	KOH
Portador de carga	$\text{CO}_3^{2-}$	$\text{O}^{2-}$	$\text{H}^+$	$\text{H}^+$	$\text{OH}^-$
Temperatura	600-730 °C	600-1100 °C	160-220 °C	60-120 °C	> 100 °C
Potencia	100 kW-2 MW	100-250 KW	50 kW-10 KW	5-250 KW	5-150 KW
Rendimiento	50-65%	55-70%	35-40%	35-40%	60%
Aplicación	Residencial, barcos, trenes	Centrales eléctricas	Residencial	Residencial, modular	Espacio, militar, transporte

Conceptos básicos de reactores electrolíticos y células de combustible

47

**CÉLULAS DE COMBUSTIBLE**



Estacionarias comerciales

Estacionarias residenciales

Portátiles



Automoción



Para móviles y PC

Conceptos básicos de reactores electrolíticos y células de combustible

48

**CÉLULAS DE COMBUSTIBLE**

El Toyota FCHV PEM FC,



Submarino Type 212 en el puerto



básicos de reactores electrolíticos y células de combustible

**PRODUCCIÓN ELECTROLÍTICA DE  $\text{Cl}_2$  Y SODA**

Conceptos básicos de reactores electrolíticos y células de combustible

**PRODUCCIÓN ELECTROLÍTICA DE  $\text{Cl}_2$  Y SODA**

**Evolución histórica:  $\text{Cl}_2$**

- Obtenido por primera vez en 1774 por C.W. Scheele.
- Producción industrial en 1779.
- Sir Humphrey Davy lo reconoció como nuevo elemento en 1808.

$$4 \text{NaCl} + 2 \text{H}_2\text{SO}_4 + \text{MnO}_2 \longrightarrow 2 \text{Na}_2\text{SO}_4 + 2 \text{H}_2\text{O} + \text{MnCl}_2 + \text{Cl}_2$$

$\text{Cl}_2$

Absorción en disoluciones alcalinas (Agua de Javelle)      Reacción con cal  $\text{CaO} + \text{Cl}_2 \longrightarrow \text{Ca}(\text{OCl})_2$

Industria textil y papelera

Conceptos básicos de reactores electrolíticos y células de combustible

**PRODUCCIÓN ELECTROLÍTICA DE  $\text{Cl}_2$  Y SODA**

**Evolución histórica:  $\text{Cl}_2$**

- Proceso Weldon**

$$4 \text{HCl} + \text{MnO}_2 \longrightarrow 2 \text{H}_2\text{O} + \text{MnCl}_2 + \text{Cl}_2$$

$$\text{MnCl}_2 + \text{CaO} + \frac{1}{2} \text{O}_2 \longrightarrow \text{CaCl}_2 + \text{MnO}_2$$
- Proceso Deacon (1874)**

$$4 \text{HCl} + \text{O}_2 \xrightarrow{\text{Cat: cloruro de cobre}} 2 \text{H}_2\text{O} + 2 \text{Cl}_2$$

**Ventajas:**  
↓ coste: regeneración  $\text{MnO}_2$   
No se forma  $\text{Na}_2\text{SO}_4$

**Inconvenientes:**  
Bajo rendimiento (35% en  $\text{Cl}_2$ )  
Baja pureza

**Recuperación de HCl residual. Motivado por legislación. (Leblanc)**  
Aún se utiliza  $R_{\text{to}} = 80\%$

Conceptos básicos de reactores electrolíticos y células de combustible

**PRODUCCIÓN ELECTROLÍTICA DE  $\text{Cl}_2$  Y SODA**

**Evolución histórica: Proceso Electrolytico**

1800 Cruickshank      Generador Siemens      Célula de diafragma (1885)  
Ánodos sintéticos de grafito      Célula de cátodo de Hg (1892)  
Célula de membrana (1970)

$$\text{NaCl} + \text{H}_2\text{O} \longrightarrow \frac{1}{2} \text{Cl}_2 + \text{NaOH} + \frac{1}{2} \text{H}_2 \quad 1 \text{ Tm } \text{Cl}_2 \leftrightarrow 1,125 \text{ Tm } \text{NaOH} \leftrightarrow 28 \text{ Kg } \text{H}_2$$

Aumento demanda de  $\text{Cl}_2$       Exceso de NaOH

Desplazamiento del método de caustificación (~ 1950)      Métodos de obtención de cloro sin soda

$$\text{Na}_2\text{CO}_3 + \text{Ca}(\text{OH})_2 \longrightarrow 2\text{NaOH} + \text{CaCO}_3$$

**ACTUALIDAD**      Producción-consumo de  $\text{Cl}_2$  y NaOH equilibrados

Conceptos básicos de reactores electrolíticos y células de combustible

**OPTIMIZACIÓN DEL PROCESO**

↑ Consumo Energía y ↑ n° celdas

- Se necesitan diseños de celda sencillos y de bajo coste.
- Se deben utilizar altas densidades de corriente (minimizar el inmovilizado).
- Los componentes de las celdas deben ser resistentes, versátiles y tener largas vidas operativas.
- Evitar las reacciones secundarias:
  - ↑ Consumo Energía.
  - Impurifican producto.
  - Corrosión.
- Bajo consumo energético.

**Selección electrodos.**

• **ÁNODO (+): Cloro**  
• **CÁTODO (-): NaOH**

Conceptos básicos de reactores electrolíticos y células de combustible

**REACCIONES SECUNDARIAS**

1. Por disolución del  $\text{Cl}_2$  producto en el anólito

$$\text{Cl}_2 + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{HClO} + \text{Cl}^- + \text{H}^+$$

$$\text{ClO}^- + \text{H}^+ \rightleftharpoons \text{HClO}$$

Según aumentan las concentraciones de  $\text{HClO}$  y  $\text{ClO}^-$  se producen las siguientes reacciones:

$$\text{ClO}^- + 2 \text{HClO} \rightarrow \text{ClO}_3^- + 2 \text{H}^+ + 2 \text{Cl}^-$$

$$2 \text{ClO}^- \rightarrow \text{Cl}_2 + \text{O}_2 + 2 \text{e}^-$$

$$\text{HClO} \rightarrow \text{HCl} + 0,5 \text{O}_2$$

$$\text{HClO} + \text{H}_2 \rightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{H}^+ + \text{Cl}^-$$

$$6 \text{ClO}^- + 3 \text{H}_2\text{O} \rightarrow 6 \text{H}^+ + 2 \text{ClO}_3^- + 4 \text{Cl}^- + 3/2 \text{O}_2 + 6 \text{e}^-$$

2. Al aumentar la conversión se produce alta concentración de  $\text{OH}^-$  en la zona cátodo  $\rightarrow$  difusión hacia el ánodo  $\rightarrow$  oxidaciones

$$2 \text{OH}^- \rightarrow \text{H}_2\text{O} + 0,5 \text{O}_2 + 2 \text{e}^-$$

$$6 \text{OH}^- + 6 \text{ClO}^- \rightarrow 2 \text{ClO}_3^- + 4 \text{Cl}^- + 1,5 \text{O}_2 + 3 \text{H}_2\text{O} + 6 \text{e}^-$$

$$\text{Cl}_2 + 2 \text{OH}^- \rightarrow \text{ClO}^- + \text{Cl}^- + 2 \text{H}^+ + 0,5 \text{O}_2 + 2 \text{e}^-$$

Conceptos básicos de reactores electrolíticos y células de combustible

**REACCIONES SECUNDARIAS**

Para evitar estas reacciones se puede:

- Disminuir la solubilidad del  $\text{Cl}_2$ :** acidulando la salmuera  
aumentando la temperatura (60-90 °C)  
aumentando la presión (1-10 atm)
- Evitar la difusión:** utilizando barreras físicas (diafragma o membrana)  
realizando las reacciones por separado (cátodo de mercurio)
- Controlar la conversión de  $\text{NaCl}$**  para limitar el contenido en  $\text{OH}^-$ .

Conceptos básicos de reactores electrolíticos y células de combustible

**OPTIMIZACIÓN DEL PROCESO**

**CONSUMO ENERGETICO Y TIPOS DE CÉLULAS**

Potenciales de equilibrio ( $E_e^C - E_e^A$ )

	ÁNODO ( $E_e^A$ )	CÁTODOS ( $E_e^C$ )
Células de <b>diafragma</b> y de <b>membrana</b>	$2 \text{Cl}^- - 2 \text{e}^- \rightarrow \text{Cl}_2 \quad E = +1,31 \text{ V}$	$2 \text{H}_2\text{O} - 4 \text{e}^- \rightarrow \text{O}_2 + 4 \text{H}^+ \quad E = +0,99 \text{ V}$ $\text{O}_2 + 2 \text{H}_2\text{O} + 4 \text{e}^- \rightarrow 4 \text{OH}^- \quad E = +0,39 \text{ V}$
Células de <b>cátodo de mercurio</b>	$2 \text{H}^+ + 2 \text{e}^- \rightarrow \text{H}_2 \quad E = -0,24 \text{ V}$ $2 \text{H}_2\text{O} + 2 \text{e}^- \rightarrow \text{H}_2 + 2 \text{OH}^- \quad E = -0,84 \text{ V}$ $\text{Na}^+ + \text{Hg} + \text{e}^- \rightarrow \text{NaHg} \quad E = -1,85 \text{ V}$	

$E_{\text{celda}} = E_e^C - E_e^A - |\eta_A| - |\eta_C| - iR_{\text{electrolito}} - iR_{\text{membrana}}$

Conceptos básicos de reactores electrolíticos y células de combustible

**CÉLULA DE DIAFRAGMA**

2  $\text{Cl}^- - 2 \text{e}^- \rightarrow \text{Cl}_2$

$2 \text{H}_2\text{O} + 2 \text{e}^- \rightarrow \text{H}_2 + 2 \text{OH}^-$

NaOH en salmuera diluida

Salmuera 25-30%

Conceptos básicos de reactores electrolíticos y células de combustible

**CÉLULA DE DIAFRAGMA**

Conceptos básicos de reactores electrolíticos y células de combustible

**CÉLULA DE CÁTODOS DE MERCURIO**

**ÁNODOS**

- Inicialmente de grafito o magnetita compactada
- Sobrepotencial de 0,5 V
- Alta velocidad de descomposición (2-3 Kg C/Tm  $\text{Cl}_2$ )
- Impurificación de productos con  $\text{CO}_2$  y CO

**Recubiertos de metales preciosos (Ti y Pt)**

- Sobrepotencial de 0,1 V
- Desgaste (0,2-0,4 g Pt/Tm  $\text{Cl}_2$ )
- Alto coste

**DSA's (Ánodos Dimensionalmente Estables)**

- Recubrimientos de  $\text{RuO}_2$  + metales preciosos
- Capa intermedia de  $\text{TiO}_2$
- Mayores sobrepotenciales para el  $\text{O}_2$
- Menores sobrepotenciales para el  $\text{Cl}_2$

Conceptos básicos de reactores electrolíticos y células de combustible



**CÉLULA DE DIAFRAGMA**

**ÁNODOS** DSA's (Ánodos Dimensionalmente Estables)  
Recubrimientos de  $\text{RuO}_2$  + metales preciosos  
Base de titanio

**CÁTODOS** Acero recubierto con un catalizador (Ni)

**DIAFRAGMAS** Inicialmente: amianto  
Posteriormente: amianto + fibras poliméricas  
Actualmente: diafragmas exentos de amianto

*Conceptos básicos de reactores electrolíticos y células de combustible* 61

**CÉLULA DE DIAFRAGMA**

**CONSECUENCIAS DEL USO DE DIAFRAGMA**

Se trata de una barrera física permeable → No distingue entre diferentes especies → NaOH diluida en salmuera

Concentración de NaOH ↑ → Difunde hacia el compartimento anódico → Hidrólisis del  $\text{Cl}_2$  para dar hipoclorito y  $\text{O}_2$

Ánodos DSA especiales → Alta sobretensión para el  $\text{O}_2$

Concentración de NaOH máxima: 12% → Etapa de concentración hasta el 50%

*Conceptos básicos de reactores electrolíticos y células de combustible* 62

**CÉLULA DE DIAFRAGMA**

**CONSECUENCIAS DEL USO DE DIAFRAGMA**

Caída de potencial considerable →  $E_e: 2,15 \text{ v}$  →  $E_{\text{celda}}: 3,2 - 3,8 \text{ v}$

Aumenta con el tiempo debido a la deposición de hidróxidos de alcalinotérreos en los poros del diafragma

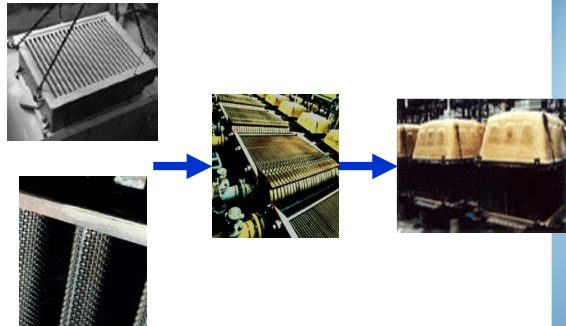
Se trabaja con salmuera purificada

Los diafragmas deben cambiarse cada pocos meses

Actualmente vida útil de hasta 2-3 años

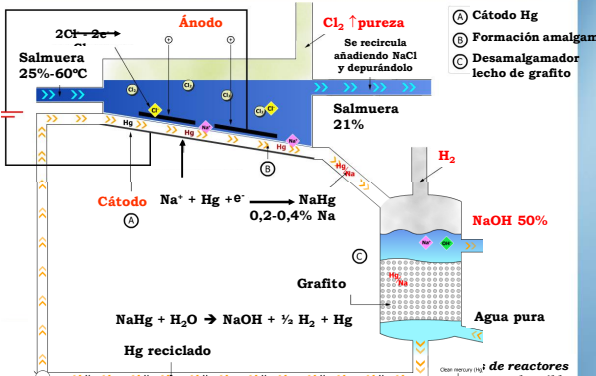
*Conceptos básicos de reactores electrolíticos y células de combustible* 63

**CÉLULA DE DIAFRAGMA**



*Conceptos básicos de reactores electrolíticos y células de combustible* 64

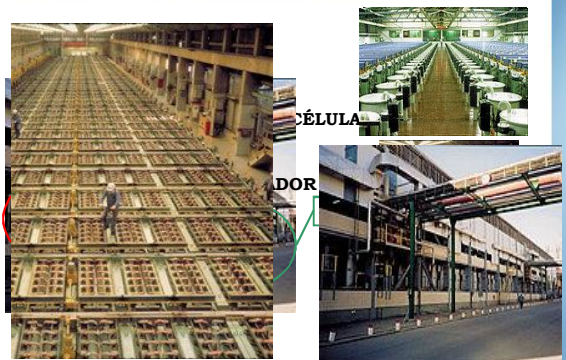
**CÉLULA DE CÁTODO DE MERCURIO**



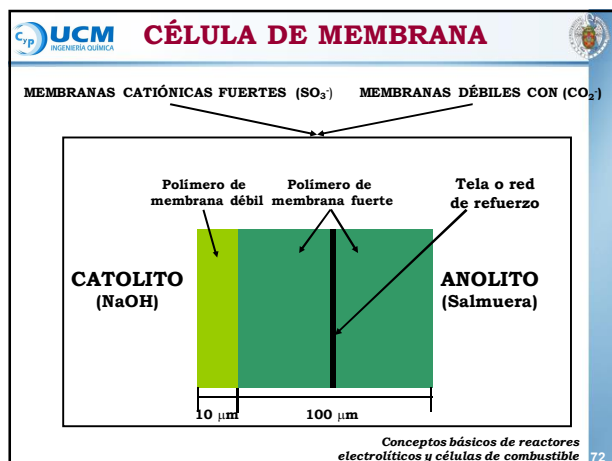
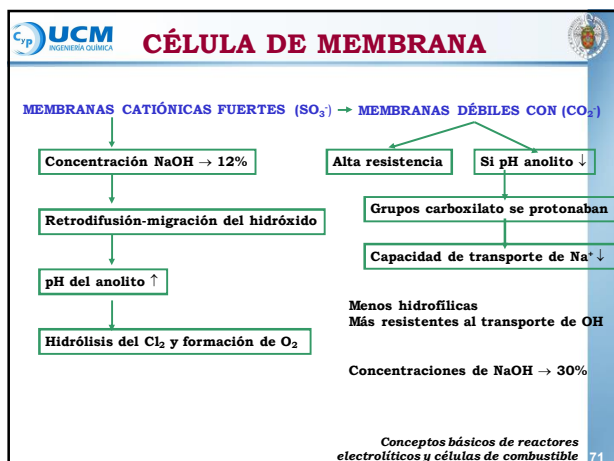
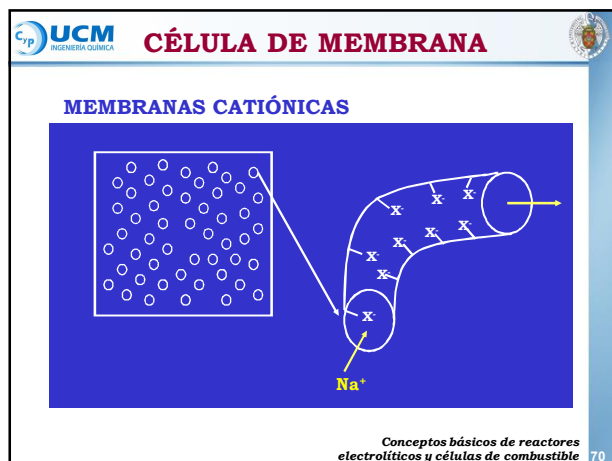
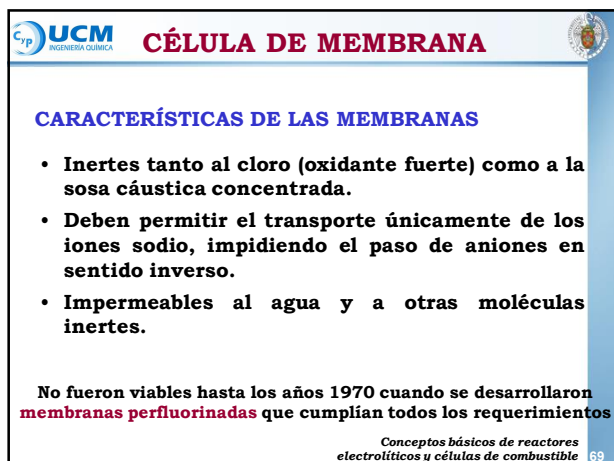
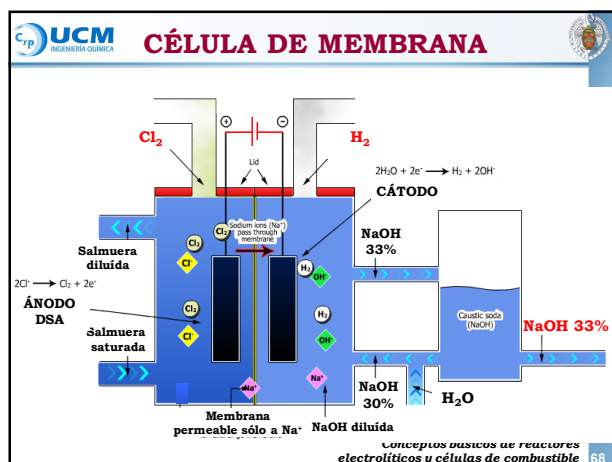
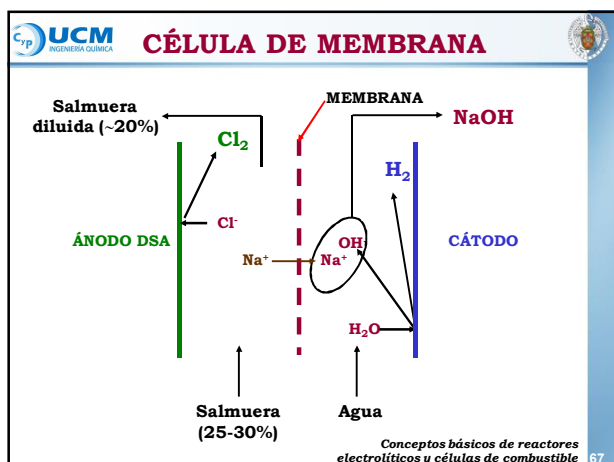
① Cátodo Hg  
② Formación amalgama  
③ Desamalgamador lecho de grafito

*Conceptos básicos de reactores electrolíticos y células de combustible* 65

**CÉLULA DE CÁTODO DE MERCURIO**



*Conceptos básicos de reactores electrolíticos y células de combustible* 66



**CÉLULA DE MEMBRANA**

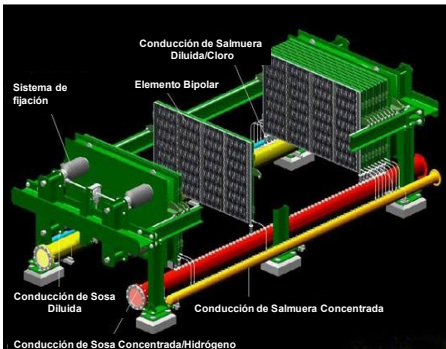
**ÁNODOS DSA**



**CÁTODOS** → Acero recubierto con un catalizador (Ni)

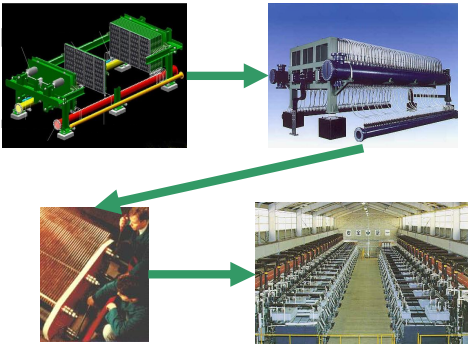
*Conceptos básicos de reactores electrolíticos y células de combustible*

**CÉLULA DE MEMBRANA**

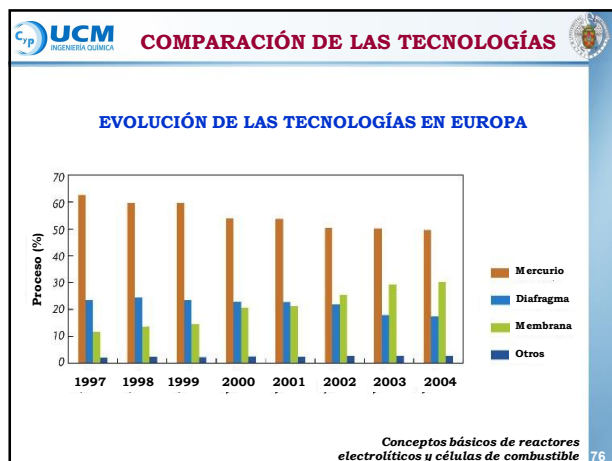


*Conceptos básicos de reactores electrolíticos y células de combustible*

**CÉLULA DE MEMBRANA**



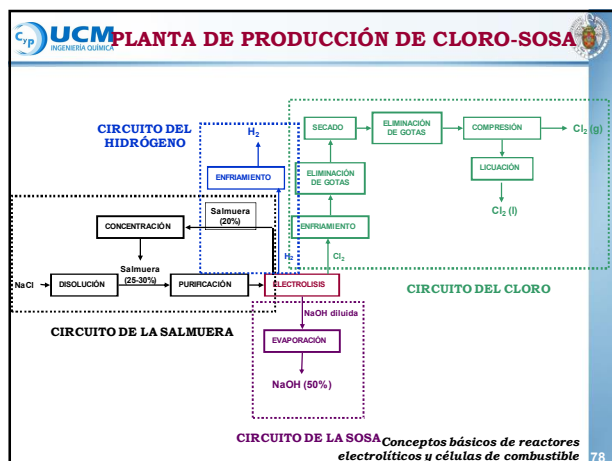
*Conceptos básicos de reactores electrolíticos y células de combustible*

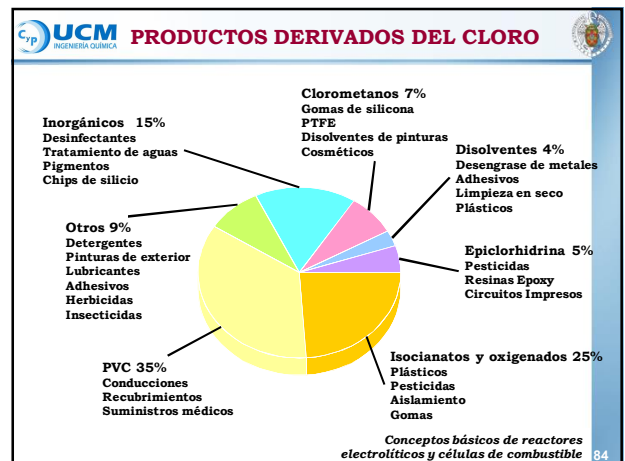
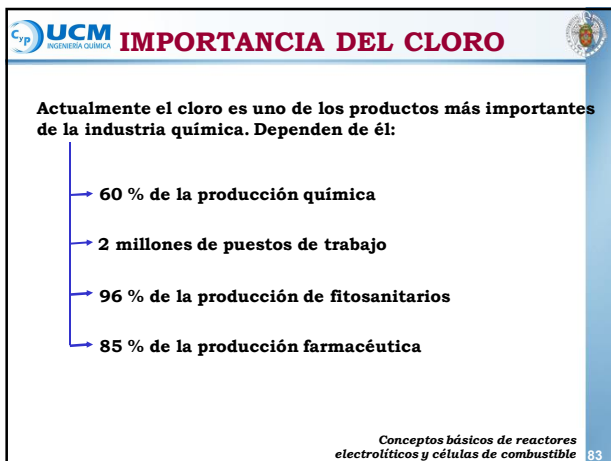
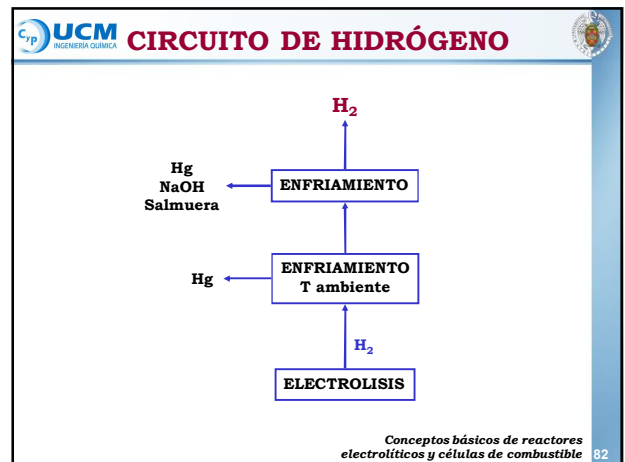
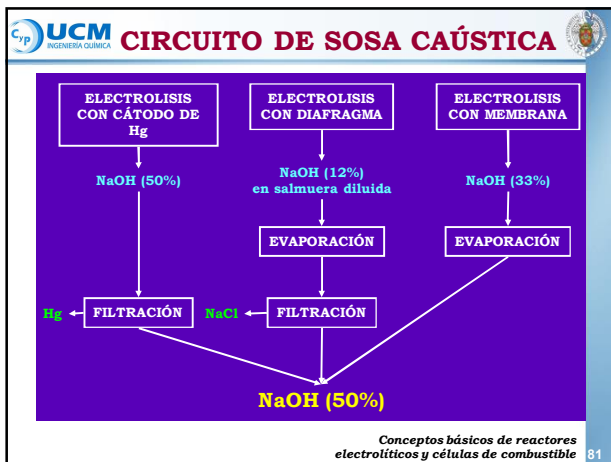
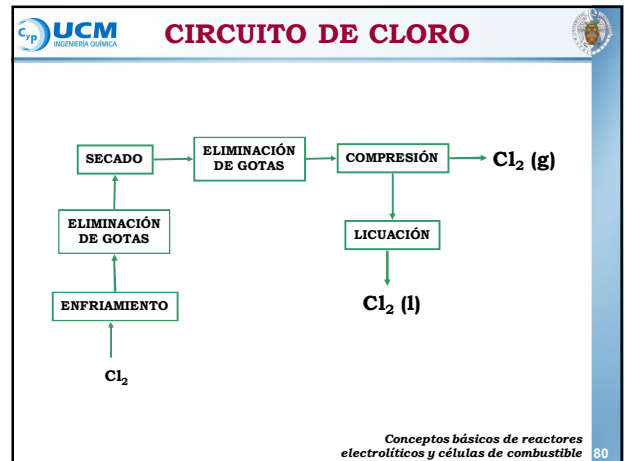
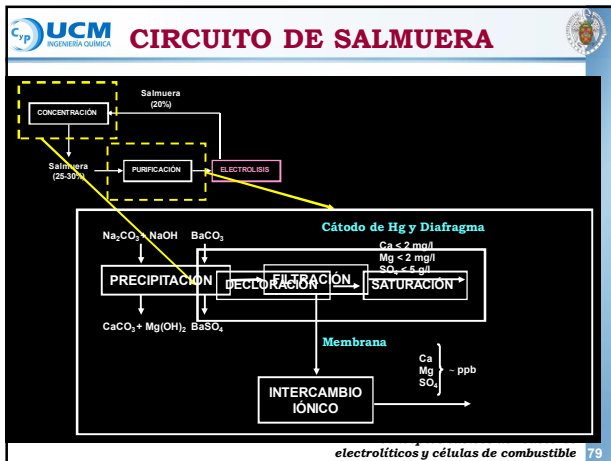


**COMPARACIÓN DE LAS TECNOLOGÍAS**

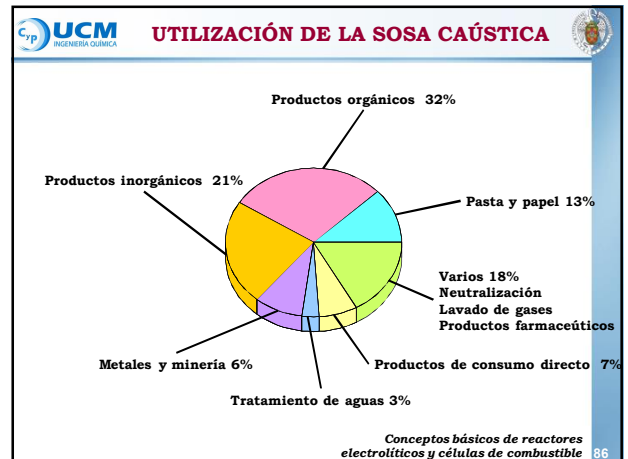
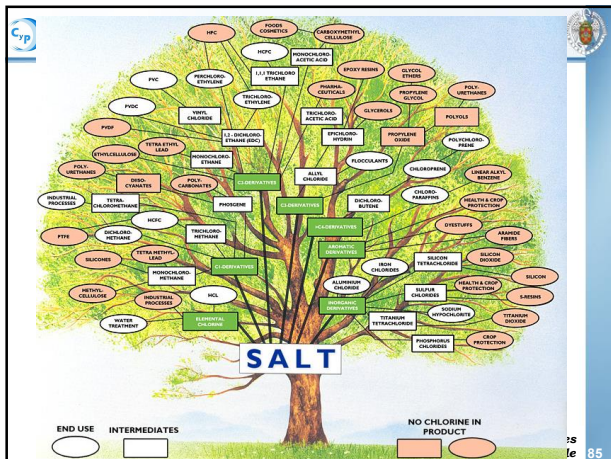
	Mercurio	Diafragma	Membrana
Voltaje teórico (V)	3,16	2,15	2,15
Densidad de corriente (KA/m <sup>2</sup> )	8 - 13	0,9 - 2,6	3 - 5
Voltaje de celda (V)	3,9 - 4,2	3,2 - 3,8	3,0 - 3,6
Concentración sosa (%)	50	12	33
Energía consumida (kWh/Tn Cl <sub>2</sub> )	3560	2970	2790
Energía para concentrar la sosa (kWh/T Cl <sub>2</sub> )	0	610	180
Total energía	3560	3580	2970

*Conceptos básicos de reactores electrolíticos y células de combustible*









### INDUSTRIA DEL ÁCIDO CLORHÍDRICO

- Aparece como residuo en las reacciones de síntesis de compuestos organoclorados a partir del  $\text{Cl}_2$ 

$$\text{R-CH}_3 + \text{Cl}_2 \longrightarrow \text{R-CH}_2\text{-Cl} + \text{HCl}$$
  - Oxidación del HCl para producir  $\text{Cl}_2$
  - Purificación del HCl producido
- Otros procedimientos:
  - Reacción entre cloro e hidrógeno.
  - A partir de sales de cloro (proceso Mannheim)
 
$$2\text{ClNa} + \text{H}_2\text{SO}_4 \longrightarrow \text{NaHSO}_4 + 2\text{HCl}$$
  - Como subproducto de procesos de incineración o pirólisis de compuestos orgánicos clorados
  - Como producto de la recuperación de lejías de proceso

Conceptos básicos de reactores electrolíticos y células de combustible

### APLICACIONES DEL ÁCIDO CLORHÍDRICO

- Reacciones de síntesis (oxicloraciones).
- Fabricación de HCl líquido:
  - ✓ Recuperación de aceites minerales
  - ✓ Preparación de productos orgánicos y cloruros inorgánicos.
  - ✓ Catalizador en hidrólisis
  - ✓ Tratamiento de arcillas y caolinita
  - ✓ Neutralizaciones y ajuste de pH

Conceptos básicos de reactores electrolíticos y células de combustible

### Problema 3

		Cátodo de Hg	Membrana
Ec		97%	93%
Vc		-4.4 V	-3.5 V
CEU eléct	$\frac{\text{De}[\text{kA/m}^2] \cdot \text{Sc} \cdot \text{Vc} \cdot 1 \text{ h} \cdot \text{nc}}{12500}$	3.52 Kwh/kg $\text{Cl}_2$	2.84 Kwh/kg $\text{Cl}_2$
CEAño eléct	$\text{CEUe} \cdot 10^8 \text{ kgCl}_2/\text{año}$	$3.52 \cdot 10^5 \text{ Mwh/a}$	$2.84 \cdot 10^5 \text{ Mwh/a}$
NaOH	$(10^5/71) \cdot 2 \cdot 40$	112676 TmNaOH/a	
CEAño térm.	$\frac{(\text{MJ/TmNaOH}) \cdot \text{TmNaOH/a}}{3.6 \text{ MJ/Kwh}}$	0	13146 Mwh/a
CEU térm	$\text{CEAter}/(10^8 \text{ kgCl}_2/\text{a})$	0	0.131kwh/Kg $\text{Cl}_2$
CEU total	$\text{CEUe} + \text{CEUt}$	3.52 Kwh/kg $\text{Cl}_2$	2.97 Kwh/kg $\text{Cl}_2$
CEAño Total	$\text{CEAe} + \text{CEAt}$	$3.52 \cdot 10^5 \text{ Mwh/a}$	$2.97 \cdot 10^5 \text{ Mwh/a}$

INGENIERÍA DE PROCESOS Tema III 2010-2011

### ELECTRODEPOSICIÓN

INGENIERÍA DE PROCESOS Tema III 2010-2011

**CONCEPTO**

La corriente eléctrica se usa para reducir cationes en disolución acuosa precipitando el producto (Me) en el cátodo (objeto conductor a recubrir), creando un fino recubrimiento alrededor de éste con el material reducido

(Bañado de metales, galvanoplastia)

Generador

Pieza (cátodo)

electrolito

INGENIERÍA DE PROCESOS  
Tema III 2010-2011 91

**APLICACIONES**

**Tratamiento superficial**

- Resistencia química, anticorrosivas
- Resistencia a la abrasión,
- Conductividad (componentes electrónicos)
- Estética (cromado, joyería,...)

**Reconstrucción de piezas desgastadas**

**Pintado electroforético**

INGENIERÍA DE PROCESOS  
Tema III 2010-2011 92

**ELECTRODEPOSICIÓN DE METALES**

**GALVANOPLASTIA o "electroplating"**

- Substrato barato: Gran número de metales y aleaciones, incluso un polímero, una cerámica o un composite.
- Recubrimiento caro con propiedades metálicas: Metal, aleaciones metálicas, polímero metálico o cerámica metálica.
- Capa delgada < 75µm. Excepción: Cr 500-1000 µm.
- Cromados: porosos, irregulares, tensiones internas
- Ligeros cambios en las condiciones del baño y del depósito producen grandes variaciones en el resultado.

Battery

Ag<sup>+</sup>

Ag<sup>+</sup>

AgNO<sub>3</sub>(aq)

Spoon

Conceptos básicos de reactores electrolíticos y células de combustible

93

**FUNDAMENTOS**

Dry cell

Object to be plated

Copper metal

Electrolytic solution

Baño = H<sub>2</sub>O + fuente de M<sup>n+</sup> sales + tampón + aditivos

94

**FUNDAMENTOS**

**Cantidad de metal electrodepositado (m)**

$m = \Phi M I t / n F$   $\Phi$  eficiencia del proceso

$I = \text{cte}$

Proceso discontinuo → dura un tiempo determinado (t).

**Velocidad por unidad de área**

$m / (A t) = \Phi M I / A n F$

**Espesor del depósito**

$e / t = \rho m / (A t) = \rho \Phi M I / A n F$

Conceptos básicos de reactores electrolíticos y células de combustible

95

**MECANISMO**

Atomo metálico incorporado a la red

EDIFICIO METÁLICO

ZONA DE DESHIDRATACIÓN

ZONA DE TRANSFERENCIA

ION SOLVATADO PERTENECIENTE A LA SOLUCIÓN

Electrodo

Plano exterior de Helmholtz

Ion hidratado

Atomos

1ª Etapa:

- Migración iónica
- Deshidratación o descomplejación

2ª Etapa: Deposición:

- Adsorción del ión
- Transf. de carga
- Difusión superficial

3ª Etapa : Electrocristalización

Conceptos básicos de reactores electrolíticos y células de combustible

96

**OPTIMIZACIÓN**

**Ánodos auxiliares**  
se introducen en diferentes posiciones para aumentar  $I$  en puntos donde de otro modo es baja si el objeto tiene formas complejas.  
Uniformidad de la capa depositada  $\rightarrow$  potencial uniforme en toda la superficie del sustrato (cátodo).

**[M<sup>+</sup>] del baño**  
Limitadas por la solubilidad y problemas de corrosión, pérdida por evaporación, descomposición química y coste.

**Aumentar la  $T^a$  y la  $I$**   
Facilita la de la difusión y por tanto la movilidad iónica, generando electrodeposición de grano fino y brillante.  
Si Mayor  $T^a$ , pero no mayor  $I$ , entonces aumenta el tamaño del cristal como consecuencia de la menor polarización.

**Optimización de la transferencia de materia**  
Aumentar el movimiento del electrolito, Uniformidad del recubrimiento.

**Otras formas de deposición**  
Deposición con pulsos  
Deposición con corriente alterna

*Conceptos básicos de reactores electrolíticos y células de combustible*

97

**EJEMPLOS**

**Instalaciones industriales**

- Cromado de plásticos
- Producción de discos de vinilo (matriz de Ni)
- Elementos decorativos



98

**PROCESOS DE MODIFICACIÓN ELECTROQUÍMICA DE LA SUPERFICIE**

**Galvanoplastia**  
**Fosfatado y cromado**  
**Pintado electroforético**

**ELECTRODEPOSICIÓN**

**Anodizado**  
**Electropulido**

**ELECTROXIDACIÓN**

*Conceptos básicos de reactores electrolíticos y células de combustible*

99

**PINTADO ELECTROFORÉTICO**

Baño=  $H_2O$  + material orgánico (pintura) + codisolvente orgánico (celulosa).

**Material orgánico:**

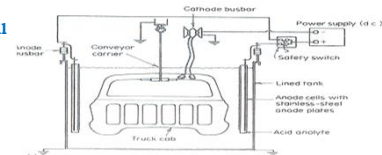
- Pintura: con grupos ácidos o básicos, que se solubilizan formando micelas por adición de un ácido o una base. Polímero cargado.
- Pigmentos orgánicos de color cargados.

**Sólidos inorgánicos:**  $CuCrO_4$ ,  $TiO_2$ .

**Concentración del baño=10% en sólidos.**

El polímero cargado se deposita por electroforesis en uno de los electrodos dependiendo de la carga del polímero.

**Primera capa del pintado del automóvil**



100

**PINTADO ELECTROFORÉTICO**

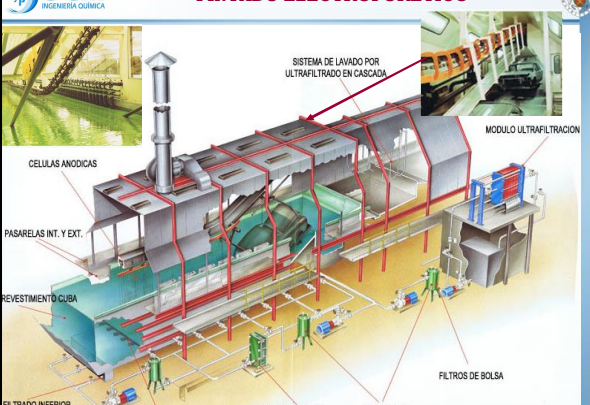
**Mecanismo**

1. Migración
2. Neutralización de la carga
3. Precipitación del Polímero neutralizado con oclusión de pigmentos y adsorción sobre la superficie
4. Renovación de agua desde el polímero por electroosmosis


*Conceptos básicos de reactores electrolíticos y células de combustible*

101

**PINTADO ELECTROFORÉTICO**



102



UCM  
INGENIERÍA QUÍMICA

PROCESOS DE MODIFICACIÓN  
ELECTROQUÍMICA DE LA SUPERFICIE

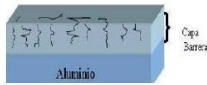


Galvanoplastia  
Pintado electroforético

ELECTRODEPOSICIÓN

**Anodizado**

- Deposición de capa de óxido protectora
- Acabado superficial del Al y Ti, Cu Acero, Ta y Nb
- $E^\circ(\text{Al}) = -1.66\text{V}$  Recubrimiento Espontáneo. (capas de  $2\text{-}20\mu\text{m}$ )



Aluminio


Capa Protectora

$$2\text{Al} + \text{H}_2\text{O} - 6e^- \rightarrow \text{Al}_2\text{O}_3 + 6\text{H}^+$$

$\text{Al}_2\text{O}_3 \cdot \text{H}_2\text{O}$   
Bohemita

**Electropulido**

- Condiciones (I o E) más severas que los anodizados.
- Se obtienen superficies muy brillantes. Libres de macrorugosidades y con aspecto muy decorativo.
- Al, Cu, Ni/Ag



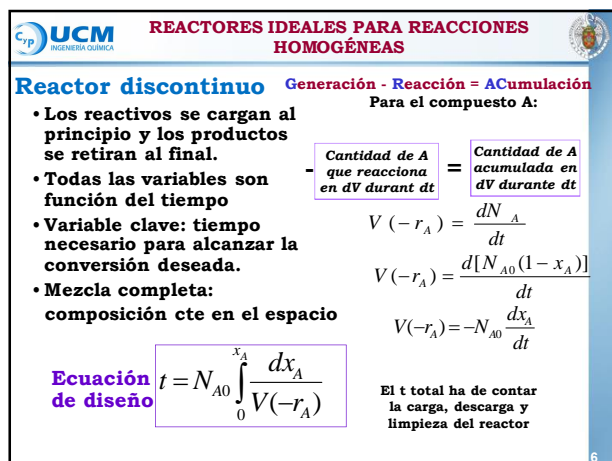
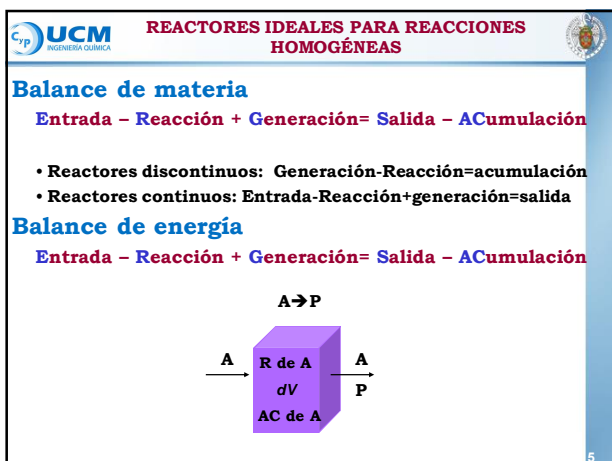
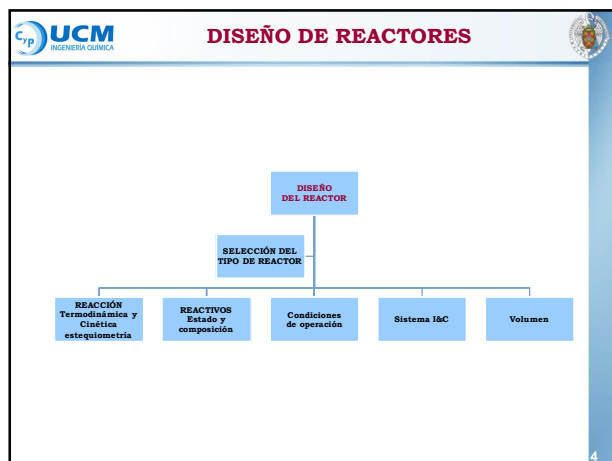
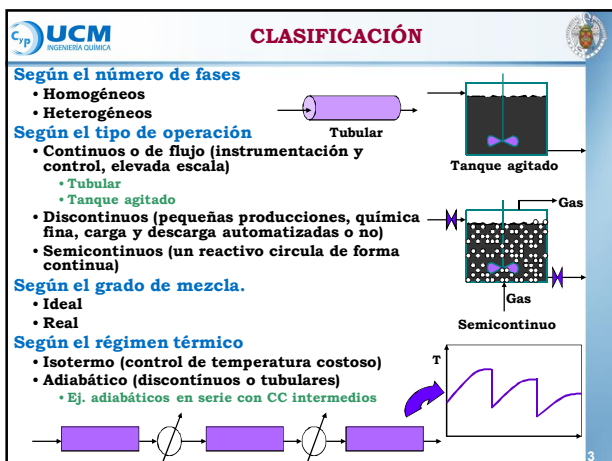
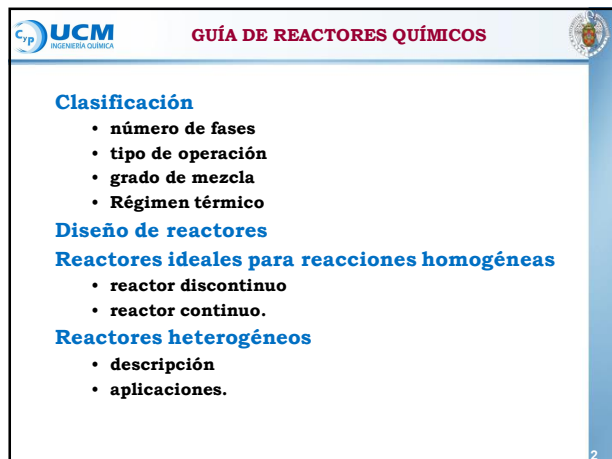
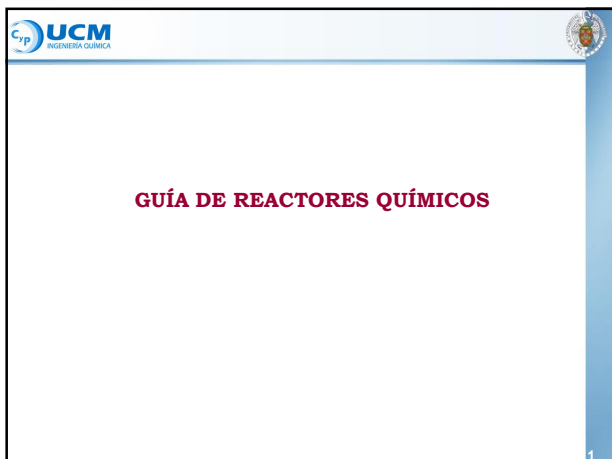
500x Before

500x After

Los básicos de reactores  
células de combustible

## **ANEXO 3.**

### **Conceptos básicos de reactores**





**REACTORES IDEALES PARA REACCIONES HOMOGÉNEAS**

### Reactor discontinuo

- Si el Volumen es cte

$$t = N_{A0} \int_0^{x_A} \frac{dx_A}{V(-r_A)} \quad t = C_{A0} \int_0^{x_A} \frac{dx_A}{(-r_A)}$$

$$C_A = C_{A0}(1 - x_A) \quad dC_A = -C_{A0} dx_A$$

$$t = - \int_{C_{A0}}^{C_A} \frac{dC_A}{(-r_A)}$$

**REACTORES IDEALES PARA REACCIONES HOMOGÉNEAS**

### Reactor discontinuo

- Si el Volumen no es cte.
- Reacciones gaseosas con variación de moles a P y T<sup>a</sup> ctes

$$V = V_0(1 + \varepsilon_A x_A) \quad C_A = \frac{N_A}{V} = C_{A0} \frac{(1 - x_A)}{(1 + \varepsilon_A x_A)}$$

- $\varepsilon_A$  = variación relativa de volumen con la conversión

$$\varepsilon_A = \frac{V_{x_A=1} - V_{x_A=0}}{V_{x_A=0}} \quad 2A \rightarrow B \therefore \varepsilon_A = \frac{1-2}{2} = -0.5$$

$$t = N_{A0} \int_0^{x_A} \frac{dx_A}{V(-r_A)} \rightarrow t = C_{A0} \int_0^{x_A} \frac{dx_A}{(-r_A)(1 + \varepsilon_A x_A)}$$

$$V = V_0(1 + \varepsilon_A x_A)$$

**REACTORES IDEALES PARA REACCIONES HOMOGÉNEAS**

### Reactor discontinuo no isotermo

- $T = f(t)$
- Necesario conocer la evolución de la temperatura
- Balance de energía en el reactor
- Suposiciones:
  - U=cte; V=cte
  - Se retira/aporta calor con fluido a T<sup>a</sup> cte (T<sub>F</sub>)
- Masa del reactor = m<sub>R</sub>
- C<sub>p</sub> del material reactor = C<sub>pR</sub>
- Calor de reacción = (-ΔH<sub>RA</sub>)
- Exotérmica: (-ΔH<sub>RA</sub>) > 0; Endotérmica: (-ΔH<sub>RA</sub>) < 0

$$(-r_A) = Ae^{\frac{E_a}{RT}} C_A^n$$

**Generación - Salida = Acumulación**

$$(-r_A)V(-\Delta H_{RA}) - UA(T - T_F) = \frac{dT}{dt}(m\bar{C}_p + m_R\bar{C}_{pR})$$

Reactor Adiabático:  $(-r_A)V(-\Delta H_{RA}) = \frac{dT}{dt}(m\bar{C}_p)$

Acumulación de calor en el material del reactor despreciable

**REACTORES IDEALES PARA REACCIONES HOMOGÉNEAS**

### Reactor discontinuo isotermo con camisa

- $T = f(t)$
- Necesario conocer la evolución de la temperatura
- Balance de energía en el reactor
- Suposiciones:
  - U=cte; V=cte
  - Se retira/aporta calor con fluido (T<sub>F</sub>)
- Masa del reactor = m<sub>R</sub>
- C<sub>p</sub> del material reactor = C<sub>pR</sub>
- Calor de reacción = (-ΔH<sub>RA</sub>)
- Exotérmica: (-ΔH<sub>RA</sub>) > 0; Endotérmica: (-ΔH<sub>RA</sub>) < 0

**Generación - Salida = 0**

$$(-r_A)V(-\Delta H_{RA}) - UA(T - T_F) = 0$$

$$(-r_A)V(-\Delta H_{RA}) = UA(T - T_F)$$

**REACTORES IDEALES PARA REACCIONES HOMOGÉNEAS**

### Reactor continuo mezcla perfecta (MP)

- Estado estacionario: Entrada - Reacción + Generac = Salida independiente de t
- Normalmente reacciones orgánicas en fase líquida
- Varios reactores en serie a diferentes T<sup>a</sup>
- Variable clave: V
- Imperfecciones del flujo de MP
  - Zonas muertas
  - Cortocircuitos

$$F_{A0} - (-r_A)V + 0 = F_{A0}(1 - x_A)$$

$$\frac{V}{F_{A0}} = \frac{x_A}{(-r_A)}$$

$$\frac{VC_{A0}}{F_{A0}} = \frac{C_{A0} - C_A}{(-r_A)} \quad \frac{l(mol/l)}{mol/s} = s$$

$$\tau = \frac{V}{Q_v} = \frac{VC_{A0}}{F_{A0}} = \frac{C_{A0} - C_A}{(-r_A)}$$

$\tau$  = tiempo espacial       $1/\tau$  = velocidad espacial

F<sub>A</sub> = caudal molar de A

**REACTORES IDEALES PARA REACCIONES HOMOGÉNEAS**

### Reactores continuos mezcla perfecta en serie

$$\frac{V_1}{F_{A0}} = \frac{x_{A1}}{(-r_A)_1} \quad \frac{V_2}{F_{A1}} = \frac{x_{A2}}{(-r_A)_2}$$

$$\tau_1 = \frac{V_1}{Q_v} = \frac{V_1 C_{A0}}{F_{A0}} = \frac{C_{A0} - C_{A1}}{(-r_A)_1} \quad \tau_2 = \frac{V_2}{Q_v} = \frac{V_2 C_{A1}}{F_{A1}} = \frac{C_{A1} - C_{A2}}{(-r_A)_2} = \frac{C_{A1} x_{A2}}{(-r_A)_2}$$

**REACTORES IDEALES PARA REACCIONES HOMOGÉNEAS**

### Reactores continuos Flujo Pistón (FP)

**Entrada - Reacción + Generac = Salida**

$$F_A - (-r_A)dV + 0 = F_A + dF_A$$

$$(-r_A)dV = dF_A \Rightarrow (-r_A)dV = F_{A0}dx_A$$

$$F_A = F_{A0}(1 - x_A) \Rightarrow dF_A = -F_{A0}dx_A$$

**Integrando**

$$\frac{V}{F_{A0}} = \int_0^{x_A} \frac{dx_A}{(-r_A)}$$

$$\frac{V}{Q_v} = \int_0^{x_A} \frac{dx_A}{(-r_A)}$$

**Si la densidad es cte**

$$\tau = \frac{V}{Q_v} = \int_0^{x_A} \frac{dx_A}{(-r_A)}$$

$$\tau = \frac{V}{Q_v} = C_{A0} \int_0^{x_A} \frac{dx_A}{(-r_A)}$$

**REACTORES IDEALES PARA REACCIONES HOMOGÉNEAS**

### Reactores continuos Flujo Pistón (FP)

- Tiempo de residencia y tiempo espacial**
  - Si la densidad es constante:
    - Tiempo de residencia = tiempo espacial = tiempo de reacción
    - La ecuación coincide con la del reactor discontinuo (T<sup>cte</sup>)
- Normalmente la densidad no es cte
  - Variaciones de T<sup>a</sup>, P o concentración locales o a lo largo del reactor
  - Tiempo de residencia = tiempo de reacción ≠ tiempo espacial
  - Las ecuaciones no coinciden

$$\tau = \frac{V}{Q_v} = C_{A0} \int_0^{x_A} \frac{dx_A}{(-r_A)}$$

$$t = C_{A0} \int_0^{x_A} \frac{dx_A}{(-r_A)(1 + \varepsilon_A x_A)}$$

**REACTORES IDEALES PARA REACCIONES HOMOGÉNEAS**

### Reactores continuos Flujo Pistón (FP)

- Balance de energía
- Si  $|\Delta H_{RA}| \uparrow \uparrow \uparrow \rightarrow T = f(L)$
- Suposiciones:
  - U=cte; V=cte
  - Se retira/aporta calor con fluido a T<sup>a</sup> cte (T<sub>p</sub>)
- Calor de reacción = (-ΔH<sub>RA</sub>)
- Exotérmica: (-ΔH<sub>RA</sub>) > 0;
- Endotérmica: (-ΔH<sub>RA</sub>) < 0

**Generación + Entrada - Salida = 0**

$$(-r_A)V(-\Delta H_{RA}) + Q_1 - Q_2 - UA(T - T_p) = 0$$

$$Q_1 - Q_2 = \sum_i F_i \bar{C}_{pi}(T_1 - T_2)_i$$

**Reactor adiabático → UA(T-T<sub>p</sub>)=0**

$$-x_A(-\Delta H_R) = \bar{C}_{pB}(T_1 - T_2)x_A + \bar{C}_{pA}(T_1 - T_2)(1 - x_A)$$

$$x_A(-\Delta H_R) = \bar{C}_{pB}(T_2 - T_1)x_A + \bar{C}_{pA}(T_2 - T_1)(1 - x_A)$$

$$x_A[(-\Delta H_R) - (\bar{C}_{pB} - \bar{C}_{pA})\Delta T] = \bar{C}_{pA}\Delta T$$

**REACTORES IDEALES PARA REACCIONES HOMOGÉNEAS**

### Comparación. Selección de reactor

- Productividad = Cantidad de producto por unidad de volumen de reactor
- Distribución de productos (selectividad)

**V Infinitos MP en serie = FP**

**REACTORES HETEROGÉNEOS**

### Problemática

- Cinética global = f (procesos físicos)
- Contacto entre fases. Elevada diversidad
  - FP
  - MP
- Puede sufrir reacción una fase o varias fases
- Ecuación de diseño depende de:
  - Tipo de reacción
  - Modelo de contacto entre fases
- Flujo no ideal: Amplia distribución de tiempos de residencia debido a zonas muertas, recirculación interna, cortocircuitos, etc.
  - Modelo de dispersión
  - Modelo de tanques en serie
  - Combinación de ambos

**REACTORES HETEROGÉNEOS**

### TIPOS

- Discontinuo o por cargas / Continuo
- Fluido-Sólido:
  - Lecho fijo
  - Lecho fluidizado
  - Lecho móvil
- Líquido-gas
  - De tanque agitado con burbujeo
  - Columna de pulverización
  - Columna de burbujeo
- Catalíticos / No catalíticos
- De apagado / Con serpentín



**REACTORES HETEROGÉNEOS**

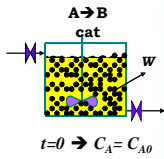
### Reactor discontinuo heterogéneo

- Cinética referida a la masa de catalizador (W)**

$$(-r_A) = \frac{1}{W} \frac{dN_A}{dt} = f(C_A)$$
- Balance de materia**

$$W(-r_A) = C_{A0} V \frac{dx_A}{dt}$$
- Ecuación de diseño si V=cte:**

$$t = \frac{VC_{A0}}{W} \int_0^{x_A} \frac{dx_A}{(-r_A)}$$

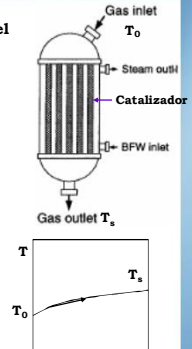


19

**REACTORES HETEROGÉNEOS**

### Reactor de lecho fijo

- Uno o más tubos rellenos de sólido a través del cual circula un fluido
- El frente de reacción se desplaza a la largo del lecho → se asemeja a flujo pistón
- Aplicación: para evitar retromezclado
- Intercambio de calor:
  - $T^{\text{mín}}_{\text{cinética}} < T^{\text{a}} < T^{\text{máx}}_{\text{termodinámica}}$  (materiales, cat. termodinámica)
- Tamaño de partícula limitado por apelmazamiento y pérdidas de carga.
- No aconsejables si el catalizador se desactiva rápidamente
- regeneración in situ del cat.: Dos o más reactores en paralelo en diferentes fases.
- Ejemplos:
  - Oxidación  $\text{SO}_2$  a  $\text{SO}_3$ , producción de  $\text{H}_2\text{SO}_4$
  - Síntesis de  $\text{NH}_3$
- Ecuación de diseño
 
$$\frac{W}{F_{A0}} = \int_0^{x_A} \frac{dx_A}{(-r_A)}$$

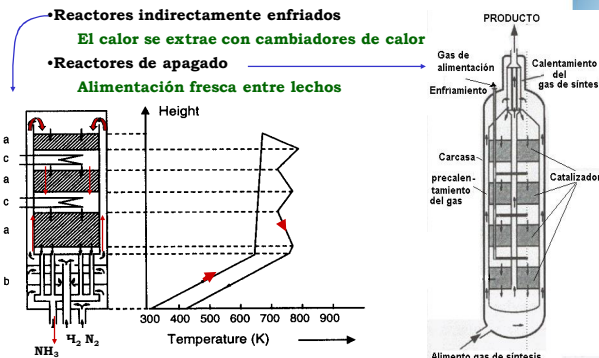


20

**REACTORES HETEROGÉNEOS**

### Reactor de lecho fijo. Eliminación del calor de reacción

- Reactores indirectamente enfriados  
El calor se extrae con cambiadores de calor
- Reactores de apagado  
Alimentación fresca entre lechos

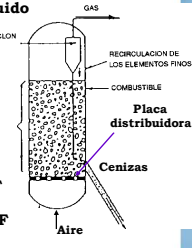


21

**REACTORES HETEROGÉNEOS**

### Reactor de lecho fluidizado

- Sólido mezclado con y por el fluido que asciende
- Se asemeja a MP para el sólido y FP para el fluido
- Veloc. Fluido ( $V$ ) >  $V_{mf}$
- Si  $V$  fluido >>  $V_{mf}$  → borboteo → no ideal
- Si  $V$  fluido >>>  $V_{mf}$  → arrastre del lecho
- Mejor control de  $T^{\text{a}}$  que LF →  $T = f(z)$
- Mejor transf. de materia que LF → cinética
  - Sólido finamente dividido (difusión interna)
  - Intensa mezcla y rég. turbulento (dif. externa)
  - Regeneración en continuo del catalizador.
- Mayor complejidad sistemas auxiliares que LF
  - Elutriación: Recuperación de finos en ciclón/es
- Control e instrumentac. más complejos que LF
- Erosión y abrasión de materiales
- No todos los sólidos se fluidizan bien
- Cambio de escala complejo
- Ejemplos:
  - Reactores FCC craqueo catalítico gasóleo
  - Gasificación carbón

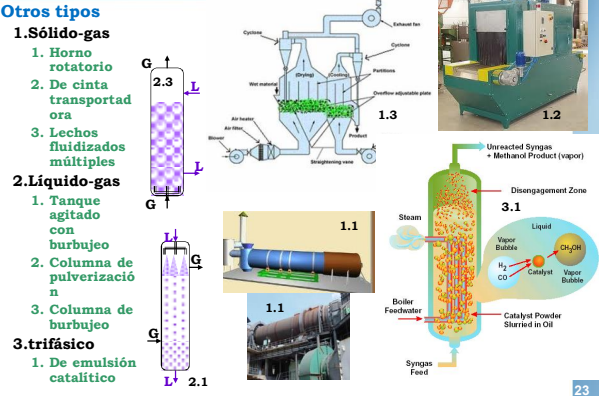


22

**REACTORES HETEROGÉNEOS**

### Otros tipos

- Sólido-gas**
  - Horno rotatorio
  - De cinta transportadora
  - Lechos fluidizados múltiples
- Líquido-gas**
  - Tanque agitado con burbujeo
  - Columna de pulverización
  - Columna de burbujeo
- Trifásico**
  - De emulsión catalítico



23

**Problema Tipo (2015)**

La reacción  $A \rightarrow R$  se lleva a cabo en fase gaseosa en un reactor tubular, en el que se puede admitir que el flujo es pistón ideal.

Las condiciones de operación son :

$T = 400^\circ\text{C}$  y  $P = 3 \text{ atm}$ ,  
constantes en todo el reactor.

Calcular las dimensiones del reactor para tratar  $2800 \text{ mol A/h}$  si se alimenta A puro y la conversión es del 60%.

- Datos :

$r = k \cdot C_A \text{ (mol/L h)}$  ;  $k_{400} = 10 \text{ h}^{-1}$ ;  
 $L/D = 10$

24

**Problema Tipo**

**Reactor continuo FP**

$(-r_A) = kC_A \text{ mol/Lh}$

$k_{400} = 10 \text{ h}^{-1}, L/D = 10$

$A \rightarrow R$

$T = 400^\circ\text{C}$   
 $F_A = 2800 \text{ mol/h}$   
 $3 \text{ atm}$   
 $T = 400^\circ\text{C}$   
 $x_A = 0.6$

$$\frac{V}{F_{A0}} = \int_0^{x_A} \frac{dx_A}{(-r_A)} \rightarrow V = F_{A0} \int_0^{x_A} \frac{dx_A}{(-r_A)} \rightarrow V = F_{A0} \int_0^{x_A} \frac{dx_A}{kC_{A0}(1-x_A)}$$

$$(-r_A) = kC_A = kC_{A0}(1-x_A)$$

$$C_{A0} = \frac{N_{A0}}{V} = \frac{P_{A0}}{RT}$$

$$V = \frac{F_{A0}}{kC_{A0}} \int_0^{x_A} \frac{dx_A}{(1-x_A)} = \frac{F_{A0}}{kC_{A0}} \ln \left[ \frac{1}{1-x_A} \right] = \frac{F_{A0} RT}{kP_{A0}} \ln \left[ \frac{1}{1-x_A} \right]$$

$$V = \frac{2.8 \text{ kmol/h} (400 + 273) \text{ K} 82 \text{ atm/L} \text{ K mol}}{10 \text{ h}^{-1} 3 \text{ atm}} \ln \left[ \frac{1}{1-0.6} \right] = 472 \text{ L}$$

25

**Problema Tipo**

**Reactor continuo FP**

$(-r_A) = kC_A \text{ mol/Lh}$

$k_{400} = 10 \text{ h}^{-1}, L/D = 10$

$A \rightarrow R$

$T = 400^\circ\text{C}$   
 $F_A = 2800 \text{ mol/h}$   
 $3 \text{ atm}$   
 $T = 400^\circ\text{C}$   
 $x_A = 0.6$

$V = 472 \text{ m}^3$

$V = \frac{\pi}{4} D^2 L = \frac{\pi}{4} D^2 (10D) \rightarrow 4.72 = \frac{\pi}{4} D^2 (10D) \rightarrow D = 0.844 \text{ m}$

$L = 8.44 \text{ m}$

$D = 0.844 \text{ m}$

26

**Problema Tipo (2014)**

En un reactor tubular continuo se realiza la reacción en fase gaseosa  $A + B \rightarrow R + S$ , a  $200^\circ\text{C}$  y  $7 \text{ atm}$ . Se alimenta una corriente con A y B en relación equimolecular, a las mismas condiciones de P y T, con un caudal de  $500 \text{ L/min}$ , medido en las mismas condiciones.

Si se quiere alcanzar una  $x_A = 0.85$ , ¿qué volumen de reactor es necesario?

- **Datos:** Cinética de la reacción:  $r = 10 C_A C_B \text{ (mol/L.min)}$

27

**Problema Tipo**

**Reactor continuo FP**

$(-r_A) = 10 C_A C_B \text{ mol/Lmin}$

$T = 200^\circ\text{C}$   
 $Q = 500 \text{ L/min}$   
 $7 \text{ atm}$   
 $T = 200^\circ\text{C}$   
 $x_A = 0.85$

$A + B \rightarrow R + S$  No varía el n° de moles

$$\frac{V}{Q} = - \int_{C_{A0}}^{C_A} \frac{dC_A}{(-r_A)} \rightarrow \frac{V}{Q} = - \int_{C_{A0}}^{C_A} \frac{dC_A}{kC_A C_B} \rightarrow \frac{V}{Q} = - \int_{C_{A0}}^{C_A} \frac{dC_A}{kC_A^2}$$

$$(-r_A) = kC_A C_B$$

$$C_B = C_{B0}(1-x_A) = C_A$$

$$C_{B0} = C_{A0}$$

$$\frac{V}{Q} = - \frac{1}{k} \left[ \frac{-1}{C_A} \right]_{C_{A0}}^{C_A} \rightarrow V = \frac{Q}{k} \left( \frac{1}{C_A} - \frac{1}{C_{A0}} \right)$$

$$C_A = C_{A0}(1-x_A) \quad C_{A0} = \frac{N_{A0}}{V} = \frac{P_{A0}}{RT} = \frac{Y_A P}{RT}$$

28

**Problema Tipo**

**Reactor continuo FP**

$(-r_A) = 10 C_A C_B \text{ mol/Lmin}$

$T = 200^\circ\text{C}$   
 $Q = 500 \text{ L/min}$   
 $7 \text{ atm}$   
 $T = 200^\circ\text{C}$   
 $x_A = 0.85$

$A + B \rightarrow R + S$  No varía el n° de moles

$C_{B0} = C_{A0}$  Sólo hay A y B  $\rightarrow Y_A = 0.5$

$$C_{A0} = \frac{Y_A P}{RT} = \frac{0.5 \times 7 \text{ atm}}{0.082 \text{ atmL/(molK)} (200 + 273) \text{ K}} = 0.0902 \text{ mol/L}$$

$$C_A = C_{A0}(1-x_A) \Rightarrow C_A = 0.0902(1-0.85) = 0.0135 \text{ mol/L}$$

$$V = \frac{Q}{k} \left( \frac{1}{C_A} - \frac{1}{C_{A0}} \right) = \frac{500 \text{ L/min}}{10 \text{ L/(mol min)}} \left( \frac{1}{0.0135} - \frac{1}{0.0902} \right) \text{ L/mol}$$

$$V = 3.1 \cdot 10^3 \Rightarrow L \approx 3.1 \text{ m}^3$$

29

## **ANEXO 4.**

### **Plantilla para la elaboración del presupuesto**

Tabla A4.1. Partida de maquinaria y aparatos

<b>Pieza o equipo</b>	<b>Número</b>	<b>Coste unitario</b>	<b>Coste total</b>	<b>IVA</b>	<b>Total</b>
<b>TOTAL</b>					

Añada todas las filas que sean necesarias

Han de tenerse en cuenta las piezas o equipos donados. Ha de indicarse el método de cálculo del coste de estos equipos.

<b>Compuesto</b>	<b>Peso</b>	<b>Coste unitario</b>	<b>Coste total</b>	<b>IVA</b>	<b>Total</b>
<b>TOTAL</b>					

Tabla A4.2. Partida de materias primas

Añada todas las filas que sean necesarias

Tabla A4.3. Coste total (máquina y aparatos + materias primas)

Maquinaria y aparatos	
Materias primas	
<b>TOTAL</b>	

El total debe ser inferior a 2000p.

## **ANEXO 5.**

**Tabla resumen para las especificaciones de los equipos**

Tabla A5.1. Resumen de las especificaciones de los equipos

<b>Componente</b>	<b>Código (Diagrama de flujo)</b>	<b>Cantidad</b>	<b>Material</b>	<b>Fabricante</b>

## ANEXO 3

### CURSO DE SEGURIDAD

*(Este curso ha sido desarrollado por AIChE)*

# “AICHE ChemE Car Safety Lecture” Part 1

**Universidad Complutense de Madrid**



**SAFETY LECTURE  
Part 1**

1

- **Brief history of the safety program.**
- **Introduction to the Engineering Documentation Package (EDP).**
- **Partial discussion of the Job Safety Assessment form (JSA).**

**SAFETY LECTURE  
Part 1**

2



- **Began in 1999 as a means to bring more student involvement into AICHE.**
- **Contains a lot of opened ended design content.**
- **Contains a chemical reaction component.**
- **The competition has been very popular and the final competition has attracted a very large audience of students and professionals.**

**Safety was not a part of the original concept.**

- **Some original cars used rocket motors, or ejected liquid into the competition area.**
- **Students transported chemicals themselves to the competition.**
- **Students stored and mixed chemicals in hotel room and tested cars in hallways of hotel.**
- **Students disposed of chemicals in easiest way.**

**From 1999 to 2005 a number of serious accidents occurred, both at the students home institution and the regional and national competitions. Some involved medical treatment and/or hospitalization of the students. These accidents involved:**

- 1. Explosions, projecting chemicals and car parts into competitors and spectators.**
- 2. Fires, requiring the use of a fire extinguisher.**
- 3. Spilling of acids and bases and other chemicals on floor.**
- 4. Improper waste disposal.**
- 5. Improper chemical transportation and use.**

**Two major accidents during competition:**

- 1. Major explosion of a pressurized pop bottle, with a very loud bang and projection of car debris into audience.**
- 2. A fire, requiring the use of a fire extinguisher.**

**Fortunately, no one was injured.**

**RESULT:** AIChE Board of Directors suspended the competition until a safety program could be developed to prevent such incidents.

**We are holding a competition with lots of spectators, using toxic, flammable and reactive chemicals, in an exhibit hall in a major hotel!**



**Developed with the assistance of a number of people, in conjunction with the ChemE car committee.**

**Four parts to the program:**

- 1. New rules / guidelines to prevent accidents.**
- 2. Mandatory training of all teams prior to competition.**
- 3. Completion of an Engineering Documentation package.**
- 4. Independent inspection and audit by industrial/academic practitioners in safety.**

**For both regional and National competitions:**

- 1. Engineering Documentation Package (EDP) must be submitted well in advance of the competition.**
- 2. The EDPs are reviewed by experienced safety folks and feedback is provided to the teams.**
- 3. A final inspection of the vehicle is done just before the competition.**

**Teams must earn the right to compete by demonstrating that they have a safe vehicle.**

## **Hazard**

**A chemical or physical condition that has potential to cause an accident.**

## **Primary hazards in Chem-E-car**

**Flammability, toxicity, reactivity, pressure, temperature, electrical, mechanical, others.**

## **Risk**

**A combination of probability and consequence.**

**You may enlist outside assistance with respect to your car safety and preparation of the EDP.**

**This includes your faculty advisor, other faculty, industrial folks, university safety person, others.**

**The ChemE car rules and EDP requirements are revised regularly - please check AIChE web site prior to regional or national meetings.**

- 1. Job Safety Analysis (JSA)**
- 2. Flow diagram of car**
- 3. Design basis for maximum operating pressure**
- 4. Design basis for estimating relieving mass flow rate**
- 5. Equipment specifications summary table and equipment specification data**
- 6. Pressure certification of vessel**
- 7. Standard operating procedures**
- 8. Test Data**
- 9. Car experimentation area floor plan**
- 10. Management system for vehicle modifications**
- 11. Management system for chemical use and disposal**
- 12. Pictures of vehicle, as it would appear on starting line**
- 13. Material Safety Data Sheets (MSDS)**

- A management system used to determine hazards associated with a particular experiment/procedure and to control the hazards.
- This works best during the initial conceptual design and construction phase of your car.

**Job Safety Assessment Form**  
**Chem E-Car**  
 2009 National Competition – Updated August 2009

University:	Vehicle Name:
JSA Author Contact Name:	Author Email:
Faculty Supervisor:	Supervisor Email:
Revision #:	Revision Date:

**Used to identify location of experiment**

Describe your car's design:
Power source:
Stopping mechanism:
Hazards inherent in design:
Safety measures:

**Provide a brief, few sentence description  
for each item in this table**

**Expected Operating Conditions:**

Temperature		Pressure	
Normal:		Normal:	
Minimum:		Minimum:	
Maximum:		Maximum:	

**List the expected normal, minimum and  
maximum values for the temperature and  
pressure**



**Personal Protective Equipment (PPE):** Check all PPE worn during operation of this Chem-E-Car. Do not list these in the procedure section.

<input type="checkbox"/> Long Pants	<input type="checkbox"/> Safety Glasses	<input type="checkbox"/> Hard Hat	<input type="checkbox"/> Apron
<input type="checkbox"/> Long Sleeves	<input type="checkbox"/> Splash Goggles	<input type="checkbox"/> Insulated Gloves	<input type="checkbox"/> Ear Protection
<input type="checkbox"/> Non-porous Shoes	<input type="checkbox"/> Face Shield	<input type="checkbox"/> Chemical Gloves	<input type="checkbox"/> Other

**This should summarize all the personal protective equipment required normally in the laboratory and PPE required for this particular experiment. Equipment that is required all the time (such as safety glasses) does not need to be listed on each step of the JSA procedure section.**

**Spill Response Supplies** - Provide the location of each item shown below at your home institution where your vehicle will be operated and tested. Show the location of this equipment on the attached floor plan. If not available, type "NA" in the field.

Item	Location
Spill Kit:	
Floor-Dri:	
Spill Dabs:	
Sodium Bicarbonate:	
Drain Plugs:	
Spill Pillows:	
Mercury Spill Kit:	
Other:	
Other:	

**Spill response supplies in the event of a chemical spill-at home institution.**



**Available Safety Equipment** – Provide the location of each item shown below at your home institution where your vehicle will be operated and tested. Show the location of this equipment on the attached floor plan. If not available, type "NA" in the field.

Item	Location
Fire Extinguisher:	
Eyewash:	
Safety Shower:	
Telephone:	
First Aid Kit:	
Spill Containment:	
Other:	

**Available safety equipment at home institution where vehicle will be tested**

**Disallowed Activities:** All activities listed below are not allowed and will result in a multi-year disqualification of your university from ChemE car competition and possible fines.

Item
(a) No transport of chemicals in private, university or rental vehicles either to or from the competition.
(b) Chemicals must not be stored in hotel rooms or other facilities not rated for chemical storage. Approved chemical storage will be provided at the host site.
(c) No vehicle testing in hotel or dorm hallways, warehouses, or other facilities that are not designed for chemical handling. This includes your university and the competition site.
(d) No improper disposal of chemicals at the conclusion of the competition. All chemicals shipped to the competition site must be disposed of in a safe and environmental fashion following all local, state and national regulatory measures. Chemical disposal will normally be provided by the host site.

Disallowed Vehicles: All of the items listed below are not allowed.

Item	Explanation
(a) Flames and/or smoke	Both inside and outside the vehicle, except for commercial internal combustion engines. See ChemE car rules for using commercial internal combustion engines.
(b) Liquid Discharge	Liquid may not be discharged under normal operating conditions.
(c) Open and/or improperly secured containers	Containing chemicals having an NFPA rating of 2 or greater. No open containers allowed at the starting line or during the operation of your vehicle. All containers with these chemicals must have secure lids and must be secured to the vehicle. All containers brought to the starting line must have lids, be properly labeled, and proper personal protective equipment must be used.
(d) Chemical pouring at starting line	Any chemicals with an NFPA rating of 2 or greater. Use a holding vessel on vehicle, with valve, to load starting chemicals.
(e) Regulated Chemicals	A number of chemicals are listed by OSHA as a special hazard. See list below. OSHA has a special regulation for each chemical. See <a href="http://www.osha.gov">www.osha.gov</a> for details.
(f) Highly Reactive / Unstable Chemicals	Any chemical, raw material, intermediate or product with an NFPA reactivity / instability rating of 4.
(g) Hydrogen peroxide	Hydrogen peroxide at concentrations of greater than 30% are not allowed.
(h) Biohazards	Biological organisms with a biohazard level greater than 1.



### Flames and/or Smoke

Both inside and outside the vehicle, except for internal combustion engines.



### Liquid Discharge

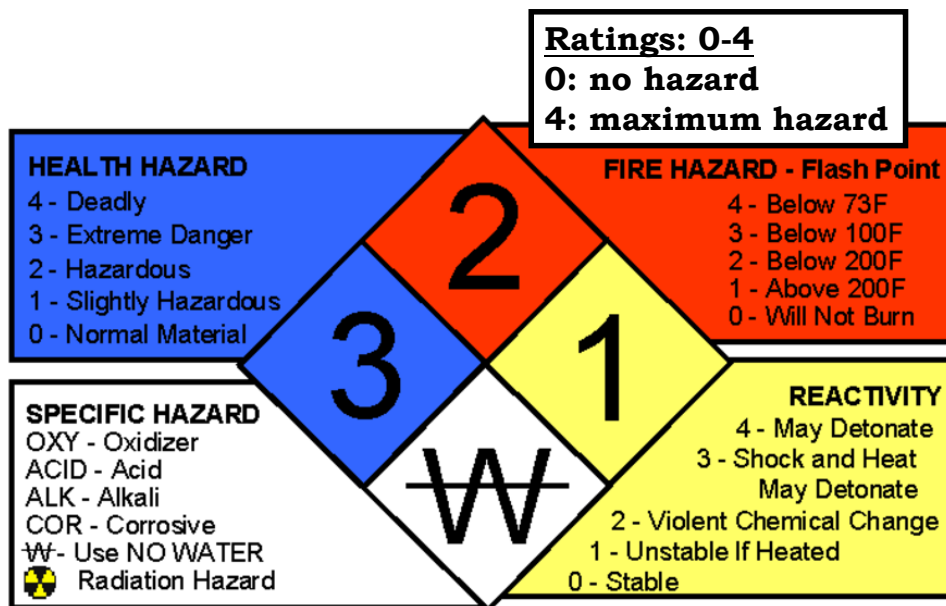
Liquid may not be discharged under normal operating conditions.

### Open and/or improperly secured containers

Containing chemicals having an NFPA rating of 2 or greater. All containers with these chemicals must be secured to the vehicle. All containers brought to the starting line must have lids and be properly labeled.



## NFPA Diamond



### Chemical pouring at starting line.

Any chemicals with an NFPA rating of 2 or greater. Use a holding vessel on vehicle, with valve, to load starting chemicals.



### Regulated Chemicals

A number of chemicals are listed by OSHA as a special hazard. OSHA has a special regulation of each chemical. See list provided.

### Some Regulated chemicals:

**Asbestos**, methyl chloromethyl ether, bischloromethyl ether, benzidine, ethyleneimine, **vinyl chloride**, inorganic arsenic, **benzene**, **acrylonitrile**, ethylene oxide, **formaldehyde**, 4,4'-Methylenedianiline, **1,3-butadiene**, **methylene chloride**.



#### Highly Reactive/Unstable Chemicals

Any chemical, raw material, intermediate or product with an NFPA reactivity/instability rating of 4.



#### Hydrogen Peroxide greater than 30% concentration

Hydrogen peroxide at greater than 30% is unstable and difficult to store and handle.



#### No biological organisms with a biohazard level greater than 1

Biohazard levels greater than 1 require special laboratory equipment and procedures that we are unable to provide during the competition.

**Vehicle Primary Hazards Checklist:** Check the left hand column box if the hazards listed below exist on the vehicle. Then check the applicable means of control for each hazard.

Hazard (check if present)	Control
<input type="checkbox"/> (a) Pressure	<p>Anything greater than 1 psig? <b>Must meet all requirements below:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li><input type="checkbox"/> Pressure gauge (must read to 2x max. operating pressure)</li> <li><input type="checkbox"/> Emergency relief device set to no more than 1.1 times max. operating pressure. Relief sizing calculations must be provided.</li> <li><input type="checkbox"/> Emergency relief device in proper location</li> <li><input type="checkbox"/> Pressure certification – see Pressure Vessel Testing Protocol</li> <li><input type="checkbox"/> Proper management system to prevent over or mis-charging.</li> <li><input type="checkbox"/> All car components exposed to pressure must be certified to operate at that pressure. Provide manufacturer's pressure specifications.</li> <li><input type="checkbox"/> No PVC, cPVC or polyethylene terephthalate (PETE or PET) plastics in pressure service.</li> </ul> <p><b>Must have measurements or calculations to prove maximum operating pressure.</b> See ChemE car rules for more details on these requirements.</p>



**Anything greater than 1 psig?**

**Must have measurements to prove maximum pressure - even if below 1 psig.**

**Must meet all requirements below:**

**Pressure Gauge – must read 2x maximum operating pressure.**

**Emergency relief device** set to no more than 1.1 times max. operating pressure.

**Sizing calculations** must also be provided.

**Emergency relief device properly located.**

**Pressure certification.** Either from equipment manufacturer or by hydrotest at 2x operating pressure.

**See model Engineering Documentation Package for examples of this.**

**Management system to prevent over or mischarging.**

**We have had several accidents caused by mischarging reactants!**

- **Have several people involved in the calculations, measuring and pouring operations.**
- **Put maximum lines on measuring containers.**
- **Tag vehicle when it has been charged.**



**All car components exposed to pressure must be certified to operate at that pressure. Provide manufacturer's pressure specifications.**



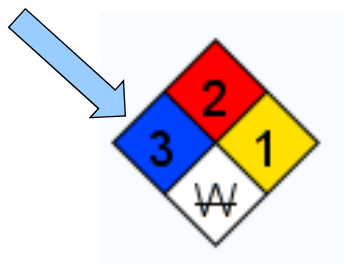
**No PVC, cPVC or polyethylene terephthalate (PETE or PET) plastics in pressure service.**





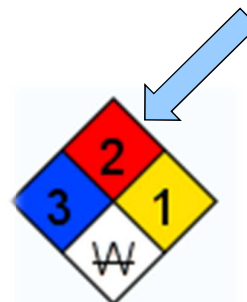
**Any chemical with an NFPA toxicity rating of 2 or higher?**

→ **Must be properly contained and handled**



**Any chemicals with an NFPA flammability rating of 2 or higher?**

→ **Must be properly contained and handled**



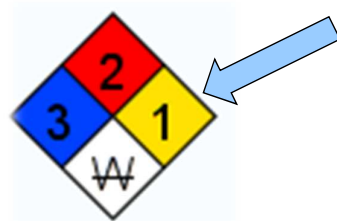




**Any chemicals with an NFPA instability/reactivity rating of 2 or 3?**

**Chemical with 4 rating not allowed!**

**→ Must be properly contained and handled**



**Any exposed surfaces greater than 150 deg. F. or under 32 deg. F?**

**→ Insulation or barriers to prevent contact**





**Exposed wiring and electrically energized components are ignition, electrocution, and a shorting/fire hazard?**

→ **Must be properly insulated**

**Alligator clips and twisted wire connections are not allowed – use binding posts or banana plugs for more secure connections**



**Any fast moving parts (meshing gears, belts or chains) that are pinch hazards?**

→ **Must be properly guarded**





**All components exposed to oxygen must:**

1. **Certified for oxygen service. Consult manufacturer's specs.**
2. **Thoroughly cleaned to remove any hydrocarbon residue/contaminants.**
3. **Not previously used in other service.**



**Does your vehicle involve any live organisms such as bacteria, yeast, viruses, fungus, or other living organisms?**

**This could include any phase of your cars operation including design, construction, preparation or competition.**

**If these organisms are used, then they must belong to the lowest biohazard level 1 (also called biosafety level). See detailed rules for more information on this.**



**Must convince inspectors that these hazards have been properly identified, managed and controlled!**

# **“AICHE ChemE Car Safety Lecture” Part 2**

**Universidad Complutense de Madrid**



**SAFETY LECTURE  
Part 2**

1

- **Complete discussion of the Job Safety Assessment form (JSA).**
- **Final details on the Engineering Documentation Package (EDP).**

**SAFETY LECTURE  
Part 2**

2

**Fabrication & Operation Additional Hazard Detail Check List:**  
construction and operation. List the major source(s) of the hazard and hazard columns are checked in an individual row, then the hazards should

Hazard	Present During		
	Construction?	Operation?	
Pressure	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	
Toxicity	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	
Flammability	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	
Reactivity / Instability	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	
Hot Surfaces/ High Temp. > 150 F	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	

**Please check hazards that are present and how they will be controlled.**

## Chemical Information Page

**List the chemical name, state, concentration, and total quantity of chemical required for the competition.**

**Chemical Quantities:** List below the chemical names, concentrations,

Chemical Name	Chemical State Solid, Liquid, Gas	Concentration Be sure

## Chemical Information Page

### Chemical Properties and Hazards

Chemical Name	Physical State S, L, G	NFPA Ratings*			
		H	F	S	Sp.

**Complete for ALL chemicals, including reactants, intermediates and products.**

## Chemical Information Page

<b>Incompatible Chemicals</b> List chemicals present within the laboratory, and any others that may come in contact.	Flash Point Temp.	Flammability Limits	
		LFL	UFL

## Chemical Information Page

Chemical Toxicology, Regulation and Disposal: List the sam

Chemical Name	Toxicology		
	TWA	PEL	Other

**TWA:** Threshold Limit Value, Time weighted average

**PEL:** Permissible exposure limit (OSHA)

These can usually be found on the MSDS.

The **Threshold Limit Value (TLV)** is the maximum exposure limit to humans for 8 hours a day, 40 hours per week, that does not cause any noticeable effect.

The **TWA** is the time weighted average.

The TLVs are promulgated by the American Conference of Governmental Industrial Hygienists (ACGIH), a professional society.

The **Permissible Exposure Limit (PEL)** is the same thing, but is promulgated by OSHA, a government organization.



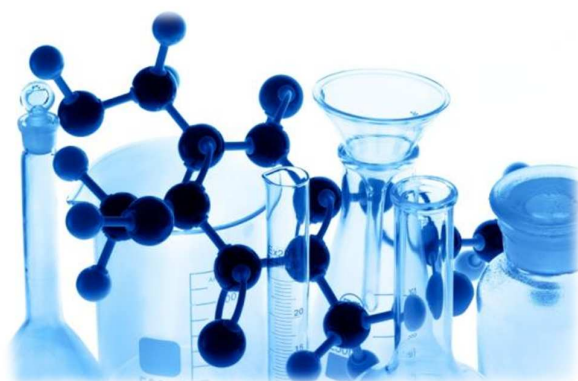
## Chemical Information Page

the chemicals that appear above, in the same order.

Hazardous Waste Number	OSHA Regulated?	Personal Protective Equipment Specific to this Chemical

## Chemical Reactions:

**Provide details on any chemical reaction(s) that occur on your car. Please show the species involved, the stoichiometry and the heat of reaction, if available. Also list side reactions and any other reactions that may impact safety.**



## Biohazards:

**Provide additional detail on the biohazards involved. List the name of the organism used, the biohazard level for this organism, and a description of how these organisms will be handled safely.**



Sequence of Steps	
Emergency Shutdown	
Start-up Procedure	
Run Time Procedure	
Shutdown Procedure	
Cleanup / Waste Disposal	

## Emergency Shutdown:

List a few things you can do prior to evacuating the laboratory.

## Start-Up Procedure:

List the steps to get ready to operate your vehicle.

## Run Time Procedure:

Steps required to operate the vehicle.

## Shut-down Procedure:

Steps required to normally stop the vehicle and return it to a safe state.

## Clean-up/Waste Disposal:

Steps required to clean the equipment and dispose of all chemical wastes.

Potential Hazards

Procedure to Control

PPE

Potential Hazards	Procedure to Control Hazard	PPE or Equipment Required

**The JSA is best applied during the conceptual design and construction of the vehicle. It is very useful for identifying the hazards in your design and developing methods to control those hazards.**

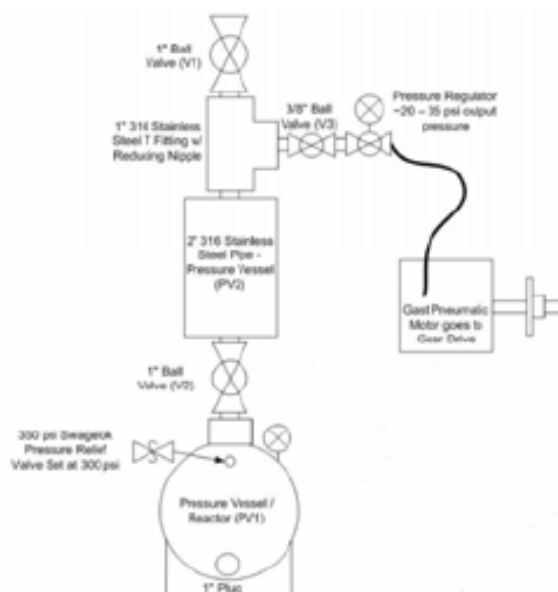
Job Safety Assessment Form  
 Chem-E-Car  
 2009 National Competition – Updated August 2009

University:	Vehicle Name:
JSA Author Contact Name:	Author Email:
Faculty Supervisor:	Supervisor Email:
Revision #:	Revision Date:

- 1. Job Safety Analysis (JSA)**
- 2. Flow diagram of car**
- 3. Design basis for maximum operating pressure**
- 4. Design basis for estimating relieving mass flow rate**
- 5. Equipment specifications summary table and equipment specification data**
- 6. Pressure certification of vessel**
- 7. Standard operating procedures**
- 8. Test Data**
- 9. Car experimentation area floor plan**
- 10. Management system for vehicle modifications**
- 11. Management system for chemical use and disposal**
- 12. Pictures of vehicle, as it would appear on starting line**
- 13. Material Safety Data Sheets (MSDS)**

**An example engineering documentation package is available on the AIChE ChemE car web site.**

**Please consult for details.**



**Diagram should label and provide identifiers for all major equipment items. Refer to these in JSA and other discussion.**

Use reaction stoichiometry, vessel volumes, equipment consumption specifications, etc., to calculate maximum pressure required to drive your car the maximum distance (100 ft) with the maximum weight (500 mL).



	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M	N	O	
1	Calculation of Chem Car Vehicle Pressure															
2	Note: This calculation assumes stoichiometric reaction.															
3																
4	Volume of vehicle vessel:			0.08 liters												
5																
6	Properties of chemicals:															
7	Specific gravity of liquid glacial acetic acid:			1.05												
8																
9	Molecular weights:			gm/gm-mole												
10	Glacial acetic acid:			60.05												
11	Sodium Bicarbonate:			84.10												
12	Sodium Acetate:			136.08												
13	Carbon dioxide:			44												
14	Water:			18												
15																
16	Note: Need to subtract water product volume from chamber volume in doing pressure calculation.															
17																
18	***** Glacial Acetic Acid *****			Sodium Bicarbonate			**Water Produced**		Carbon Dioxide		Gas Volume		**** Pressure ****		Gas Volume at 1 atm, 60 F	
19	(ml)	gm	gm-moles	gm-moles	gm	gm-moles	ml	gm-moles	Liters		atm		psi		ft <sup>3</sup>	
20	10,000	10,500	0.175	0.175	14,690	0.175	3,147	0.175	3.077		1.890		26,428		0.148289	
21	10,000	10,500	0.175	0.175	14,690	0.175	3,147	0.175	3.077		1.890		26,428		0.148289	
22	20,000	21,000	0.350	0.350	29,379	0.350	6,290	0.350	3.074		2.782		46,899		0.252538	
23	30,000	31,500	0.525	0.525	44,069	0.525	9,442	0.525	3.071		4.179		61,411		0.336807	
24	40,000	42,000	0.699	0.699	58,758	0.699	12,596	0.699	3.067		5.576		81,965		0.385076	
25	50,000	52,500	0.874	0.874	73,448	0.874	15,717	0.874	3.064		6.977		101,542		0.511345	

**The relief device protects your vehicle from high pressure by relieving mass from your ChemE car process.**

**Your required relief device is only capable of expelling material at a fixed max. rate. This information is available from the vendor's equipment specifications.**

**The relief device must be capable of discharging mass as fast as it is being produced by your chemical reaction.**

**However, information on the reaction rate is not usually available unless extensive experiments are done.**

**Thus, your only approach is to prevent excessive pressures by stoichiometric control. Must convince reviewers that you have achieved this.**

## Equipment Specifications Summary Table/Data

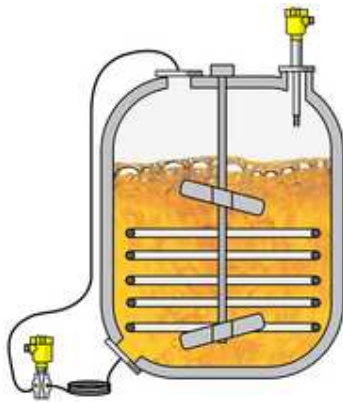
**Provide a summary table listing each major piece of equipment. Include valves, tubing, pipes, vessels, regulators, turbines, etc. List important specs, such as temperature and pressure, material of construction, etc.**

**Provide copies of the vendor's equipment specification sheets for all equipment.**

Equipment Specifications Summary Table

Equipment Item	Vendor / Model	Material of Construction	Critical Design Specification
Vessel Sheet Metal	MacSteel	Stainless 304	Max. Temperature: 925°F Tensile strength: 600 MPa
Relief Device – Spring operated	Swagelok E3A	Stainless	Set pressure: 300 psig 12 SCFM discharge rate at set pressure
Regulator	Granger R354-S	Stainless	Temperature range: 0°C to 65°C Supply pressure max: 21 bar Set to 20 psi outlet pressure
Stainless steel ball valve – 1-inch	Golden Highope Model CMA-2F	Stainless	1000 psi at 450°F
Stainless steel pipe – 3-inch	Generic	Stainless	Pressure rating: 1500 psig at 100°F
Gas air motor	Gas model 37L22	Various	Max. pressure: 80 psi This will operate at 20 psi with an rpm of 1000 and 5 SCFM gas flow
Manufactured pressure vessel	Manufactured	Stainless 304	Tested to 560 psig with no measurable deformation of vessel. See pressure certification.





**See Appendix A in the Safety Rules and also the example Engineering Documentation package.**

**A new vessel can be certified by the original vendor, but if over 5 years old, or damaged or corroded, it must be recertified. This can be done by your team, or by an outside vendor.**

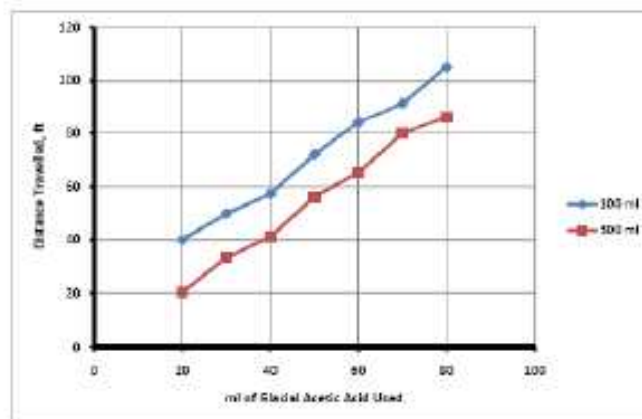
**These can be developed directly from the Safe Operating Procedures Page of the JSA. Include only the steps, not the hazards and controls.**

## Start-up Procedure

1. Donne PPE, including safety glasses and gloves.
2. Place beaker on spill tray.
3. Weigh out the designated mass of sodium bicarbonate in a beaker using the scale.
4. Place graduated cylinder on spill tray.
5. Measure designated volume of glacial acetic acid using a graduated cylinder. Leave in graduated cylinder.
6. Measure out in graduated cylinder required water based on sodium bicarbonate solubility. Add 20% extra to insure all dissolved.
7. Open 1" plug in pressure vessel.
8. Carefully pour sodium bicarbonate powder thru hole.
9. Close 1" hole in PV1 with 1" plug. Tighten fully.
10. Close valve V3 to insure that liquid does not enter regulator.



**Need some indication that you have run the vehicle and have some data.**



**Provide a layout of the area you will be testing your vehicle at your home institution. Show location of safety equipment:**

- Fire extinguisher
- Safety shower/eyewash
- Spill kit
- Fire alarm
- First aid kit

**This section applies to changes done after your engineering documentation package as been reviewed. The purpose of this is to inform the inspectors of the changes that have been made since the EDP was reviewed and to insure that any new hazards have been identified and addressed.**

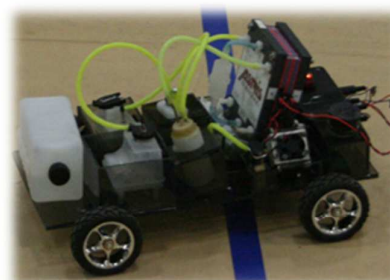
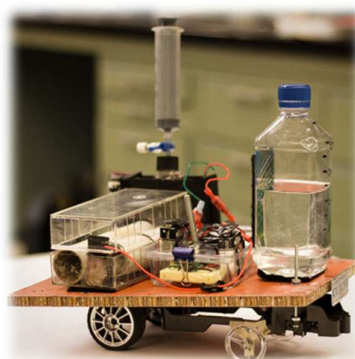
**See the example EDP.**

**This applies to chemical storage, use and disposal at your home institution and also the competition.**

**See example  
Engineering  
Documentation  
Package**



**The picture must show exactly how the vehicle will look at the starting line of the competition.**



**Provide vendor supplied MSD sheets for all reactants, products and intermediate chemicals. Include any solvents or other utility chemicals that are used.**

## **BOC GASES**

### MATERIAL SAFETY DATA SHEET

PRODUCT NAME: CARBON DIOXIDE, GAS

#### 1. Chemical Product and Company Identification

BOC Gases,  
Division of  
The BOC Group, Inc.  
575 Mountain Avenue  
Murray Hill, NJ 07974

BOC Gases  
Division of  
BOC Canada Limited  
5975 Fairbairn Street, Unit 2  
Mississauga, Ontario L6R 3W6

**You need to identify the hazards on your ChemE car, control or eliminate these hazards, and then convince the EDP reviewers and the inspectors that this has been done successfully.**

**You also need to follow the management procedures outlined in the rules: JSA preparation, EDP submission, and car inspection.**

- **Now that you have viewed the Chem-E-Car Safety Training presentation, please access [www.aiche.org/chemecartest](http://www.aiche.org/chemecartest) to take the required qualification test.**
- **Once you pass the test with an 80% or higher score, your name will be added to the list of qualifiers maintained at AIChE headquarters.**
- **If you fail the test, you will be given another opportunity to pass.**

**Good luck for your competition!**

**Have a safe experience!**



## ANEXO 4

### CUESTIONARIOS DE SEGURIDAD

*(Preguntas extraídas de los cuestionarios desarrollados  
por AIChE)*

**Actividad 3.- Evaluación de la Seguridad del Proceso**  
**Prueba de evaluación**

---

1. The pressure gauge requirement for cars involving pressure is:
  - A. The pressure gauge must read up to the MAWP.
  - B. The pressure gauge must read up to the maximum operating pressure.
  - C. The pressure gauge must read up to a minimum of 2 times the maximum operating pressure.**
  - D. The pressure gauge must read up to 2 times the MAWP.
2. The Threshold Limit Value (TLV) is the maximum exposure limit for humans without any adverse effects for:
  - A. 8 hours a day, 40 hours per week.**
  - B. Continuous exposures.
3. The Threshold Limit Value Average (TLV-TWA) represents:
  - A. The minimum exposure to a toxicant for 8 hours a day/forty hours a week.
  - B. The maximum exposure to a toxicant for 8 hours a day/forty hours a week.**
  - C. An exposure which is not allowed for even brief periods of time.
  - D. The maximum exposure to a toxicant for continuous exposures.
4. The temperature above which exposed surfaces must be insulated or protected by barriers is:
  - A. 150°F.**
  - B. 200°F.
  - C. 100°F.
5. To transport chemicals to the competition site:
  - A. The chemicals must be shipped to the site directly from the chemical supplier.**
  - B. The chemicals can be transported in private automobiles.
  - C. The chemical can be transported in normal University cars.
6. Alligators plugs and twisted wire connections are:
  - A. Not allowed.**
  - B. Allowed.
7. The maximum biohazard (biosafety) level allowed for biological organisms is:
  - A. 4.
  - B. 1.**
  - C. 3.
  - D. 2.

**Actividad 3.- Evaluación de la Seguridad del Proceso**  
**Prueba de evaluación**

---

8. To compete in the Chem-E-Car competition:
- A. All members of the team must take AICHE provided safety training.**
  - B. Only one member of the team must take AICHE provided safety training.
  - C. Only a few members of the team must take AICHE provided safety training.
9. Open containers on your Chem-E-Car:
- A. Are always allowed.
  - B. Are never allowed for chemicals with a NFPA health rating of 2 or higher.**
  - C. Are allowed temporarily at the starting line.
10. The best location for an emergency relief device on a pressure vessel is:
- A. At the middle of the vessel.
  - B. Connected to the vessel by a length of pipe.
  - C. At the bottom of the vessel.
  - D. At the very top of the vessel.**
11. Pressure vessels must be recertified if the vessel shows physical signs or wear or abuse or is over the following age limit:
- A. 3 years.
  - B. 10 years.
  - C. 5 years.**
  - D. 1 year.
12. A hazard is:
- A. Something that is dangerous.
  - B. A chemical or physical condition that is certain to cause an accident.
  - C. A chemical or physical condition that has the potential to cause an accident.**
  - D. Something that should always be eliminated and avoided.
13. Liquid discharge is:
- A. Always allowed.
  - B. Allowed, but only during normal operation.
  - C. Never allowed during normal operation.**
14. Chemicals with the following NFPA stability (reactivity) hazard class are not allowed under any circumstances:
- A. 1.
  - B. 2.
  - C. 3.
  - D. 4.**



**Actividad 3.- Evaluación de la Seguridad del Proceso**  
**Prueba de evaluación**

---

15. The Job Safety Assessment (JSA) form is:
- A. Only used during the inspection of your vehicle.
  - B. A management system used to determine hazards associated with a particular experiment/procedure and to control the hazards.**
  - C. Used to insure the safety of your vehicle.
16. The pressure relief device must have a set pressure:
- A. Set to no more than 1,1 times the maximum operating pressure.**
  - B. Set to no more than 1,1 times the MAWP.
  - C. Set to no more than the MAWP.
  - D. Set to no more than the maximum operating pressure.
17. The engineering Documentation Package (EDP) is a compilation of information that:
- A. Is only used by the inspectors to review the safety of your vehicle.
  - B. Is a living document to assist your team with vehicle safety. It should be assembled and modified during the entire lifetime of your vehicle.**
  - C. Is assembled just before the submission deadline.
18. The pressure above which special requirements for pressure hazards must be met is:
- A. 1.0 psig.**
  - B. 10 psig.
  - C. 5.0 psig.
  - D. 0.5 psig.
19. To prevent overcharging or mischarging of chemicals to your Chem-E-Car:
- A. No special requirements are necessary since common sense prevails here.
  - B. A management system is required to prevent this from occurring.**
20. The maximum concentration allowed for hydrogen peroxide for any use is:
- A. 20%.
  - B. 30%.**
  - C. 10%.
  - D. 70%.
  - E. 100%.
  - F. 40%.
21. Pressure certification of a pressure vessel is done using:
- A. The actual gas that the vessel will contain.
  - B. Water.**

**Actividad 3.- Evaluación de la Seguridad del Proceso**  
**Prueba de evaluación**

---

22. Double containment must be provided for:
- A. Chemicals with an NFPA health rating of 2 or more.**
  - B. All chemicals on the Chem-E-Car.
23. For any Chem-E-Cars with pressure:
- A. Only the major components exposed to the pressure need to be rated for pressure.
  - B. The components exposed to the pressure do not need to be rated for pressure.
  - C. All of the components exposed to the pressure need to be rated for pressure.**
24. For design and construction of your Chem-E-Car outside assistance is not allowed. However, for safety issues related to your car:
- A. Outside assistance is not allowed.
  - B. Outside assistance is allowed, and even encouraged.**
25. For pressure service, PVC, cPVC or polyethylene terephthalate (PETE or PET) is:
- A. Allowed.
  - B. Not allowed.**
26. The NFPA diamond includes the following four hazards:
- A. Health, flammability, volatility and special hazards.
  - B. Health, solubility, stability (reactivity) and special hazards.
  - C. Health, flammability, stability (reactivity) and special hazards.**
27. A regulated chemical is:
- A. A chemical with a special regulation written specifically for that chemical.**
  - B. All chemicals since they are all regulated.
28. A chemical labels must be entirely in:
- A. Any convenient language for the users.
  - B. English.**
29. Risk is composed of:
- A. Consequence and probability.**
  - B. Consequence.
  - C. Odds of winning.
  - D. Probability.

**Actividad 3.- Evaluación de la Seguridad del Proceso**  
**Prueba de evaluación**

---

30. If you Chem-E-Car uses oxygen under temperature and pressure:
- A. All of the components exposed to oxygen need to be rated for oxygen service.**
  - B. Only the major components exposed to oxygen need to be rated for oxygen service.
  - C. The components exposed to the oxygen do not need to be rated for oxygen service.
31. Prior to submission of your Engineering Documentation Package, your CHEM-E-Car faculty adviser must certify that your team:
- A. Has followed all of the safety rules.
  - B. Has completed a safety review under their supervision or with an outside expert.
  - C. Has at least ten hours of operating experience.
  - D. All of the above.**
  - E. Has completed the Engineering Documentation Package.
32. Flames and/or smoke are:
- A. Allowed but only on the inside of your vehicle.
  - B. Always allowed.
  - C. Never allowed, except for internal combustion engines.**
  - D. Allowed temporarily at the starting line.
33. All containers with chemicals in the preparation area must be labeled with the following minimum label requirements:
- A. The identity of the Chem-E-Car team.
  - B. The identity of the chemical contents.
  - C. The identity of the Chem-E-Car team and the identity of the chemical contents.**
34. The only sure way to prevent high pressures in your Chem-E-Car:
- A. Use equipment that is rated for very high pressure.
  - B. Stoichiometric control to insure that the reactions will never result in high pressures.**
  - C. Use a relief system to prevent high pressures.
35. For the safety inspections that are completed just before the Chem-E-Car competition:
- A. The Chem-E-Car team must earn the right to compete by showing to the inspectors that the hazards have been identified and controlled properly.**
  - B. The Chem-E-Car team has the right to compete-the inspectors must show that the car is unsafe in order to be disqualified.
  - C. The inspections are done to punish any teams that do not have safe vehicles.

**Actividad 3.- Evaluación de la Seguridad del Proceso**  
**Prueba de evaluación**

---

36. Trial runs of your Chem-E-Car at the competition are:
- A. Not allowed.**
  - B. Allowed.
37. The maximum pressure in your Chem-E-Car is the:
- A. Maximum pressure in your car during maximum distance and load.**
  - B. Maximum pressure in your car during average distance and load.
38. The maximum pressure in your Chem-E-Car is determined:
- A. By experimental confirmation only.
  - B. By calculation only.
  - C. By calculation to get an initial estimate and then by experimental confirmation.**
39. For oxygen service:
- A. No cleaning is required prior to service.
  - B. All components must be cleaned prior to service.**
  - C. Only major components must be cleaned prior to service.
40. Pressure certification must be provided for:
- A. No equipment.
  - B. Only major pieces of equipment.
  - C. All equipment exposed to pressure.**

## ANEXO 5

### GUÍA METODOLÓGICA DE SEGURIDAD

*(Basada en información facilitada por AIChE)*

## CONTENIDOS:

<b>REQUISITOS DE SEGURIDAD .....</b>	<b>1</b>
1. OPERACIÓN Y MANEJO DE PROTOTIPOS.....	1
2. COMPUESTOS QUÍMICOS .....	2
3. REQUISITOS DE SEGURIDAD QUÍMICA DEL PROTOTIPO .....	3
4. SEGURIDAD DE EQUIPOS A PRESIÓN .....	5
5. RIESGOS DEBIDOS A LA TEMPERATURA.....	8
6. RIESGOS ELÉCTRICOS .....	8
7. RIESGOS MECÁNICOS.....	8
8. RIESGOS POR OXÍGENO .....	8
9. RIESGOS BIOLÓGICOS .....	10
<b>FUENTES DE CONSULTA SOBRE RIESGOS QUÍMICOS.....</b>	<b>11</b>
1. HOJAS DE SEGURIDAD DE PRODUCTOS QUÍMICOS.....	11
2. NFPA .....	11
3. GUÍA DE BOLSILLO SOBRE PELIGROS QUÍMICOS .....	11
4. GUÍA TÉCNICA, DEL INSHT, PARA LA EVALUACIÓN Y PREVENCIÓN DE LOS RIESGOS RELACIONADOS CON AGENTES QUÍMICOS .....	11
5. REACH: REGLAMENTO EUROPEO RELATIVO AL REGISTRO, LA EVALUACIÓN, LA AUTORIZACIÓN Y LA RESTRICCIÓN DE LAS SUSTANCIAS Y MEZCLAS QUÍMICAS.....	12

#### REQUISITOS DE SEGURIDAD

Para poder participar en la competición Chem-E-Car de AIChE hay que respetar una serie de normas de seguridad, recogidas en el documento de normas de seguridad disponible en el enlace: [http://www.aiche.org/sites/default/files/docs/pages/chem-e-car\\_safety\\_rules\\_2014.pdf](http://www.aiche.org/sites/default/files/docs/pages/chem-e-car_safety_rules_2014.pdf) y superar un curso de seguridad que consta de dos lecciones, a las que se accede a través del enlace: <http://www.aiche.org/community/students/chem-e-car-competition-rules/safety-training-test>; y un test de evaluación en el que hay que acertar al menos el 80% de las cuestiones para resultar apto. Para preparar el test se puede emplear el curso de seguridad y los cuestionarios desarrollados (**Actividad 3**).

Las normas de seguridad afectan al diseño del prototipo, al modo de operación del mismo y a la forma de trabajar de los componentes del grupo. Todas estas normas hay que aplicarlas desde el principio, por lo que se explican a continuación y se dan algunas directrices para facilitar su cumplimiento.

Hay que tener en cuenta, que en las normas de seguridad de la competición de Chem-E-Car de AIChE se exige la elaboración y presentación de un informe por cada incidente que tenga lugar, no sólo en la competición, sino en cualquier etapa previa de trabajo, y que el acceso al concurso puede verse condicionado por dicho incidente. Por lo tanto, aunque algunas normas se refieran al concurso en sí, han de ser aplicadas desde el primer día de trabajo, con el fin de evitar incidentes.

Los requisitos de seguridad que deben cumplir los prototipos, diseñadores y operadores se pueden agrupar en los siguientes puntos:

##### 1. Operación y manejo de prototipos

- 1.1. La operación o prueba de los prototipos sólo puede llevarse a cabo en los laboratorios habilitados para ello por la universidad.
- 1.2. Los alumnos que preparen los compuestos químicos y los que operen el prototipo han de utilizar adecuadamente todos los equipos de protección personal (EPIs) que sean necesarios según los diferentes riesgos que conlleven las operaciones a realizar por cada uno. Estos EPIs incluyen: gafas de seguridad, bata de laboratorio, guantes, máscaras y protección auditiva (tapones o cascos). Para más información sobre los EPIs, se recomienda consultar la guía correspondiente del Instituto Nacional de Seguridad e Higiene en el Trabajo (INSHT), que se descarga gratuitamente en el enlace: <http://www.insht.es/InshtWeb/Contenidos/Normativa/GuiasTecnicas/Ficheros/epi.pdf>
- 1.3. Todos los recipientes con productos químicos, incluyendo botellas, vasos de precipitados, jeringas y bolsas de plástico deben estar etiquetados correctamente. Esto incluye recipientes que contengan reactivos, productos

intermedios, productos o mezclas. La etiqueta debe incluir como mínimo: la identificación del producto/s químico/s, y el nombre del grupo.

- 1.4. Todas las operaciones de trasvase o mezcla de productos químicos, han de llevarse a cabo sobre una bandeja de contención con capacidad superior al máximo volumen manejado durante dicha operación. El material de la bandeja ha de ser compatible con los productos químicos que se manejen dentro de la misma. Aunque esta norma y la anterior corresponden a una regla de AIChE relativa al día de la competición, es necesario aplicarlas siempre, en todas las etapas previas a la misma, para evitar incidentes, aunque AIChE no lo exija.
- 1.5. Los residuos generados han de depositarse en los contenedores adecuados habilitados en los laboratorios de la universidad y, el día de la competición, en los habilitados ese día, que estarán en una zona de preparación de reactivos, que se habilitará para manejar y preparar los productos químicos.

## 2. Compuestos químicos

Las normas de seguridad del concurso de Chem-E-Car de AIChE prohíben el empleo de ciertas sustancias peligrosas o reacciones que puedan generarlas, con el fin de proteger a los concursantes y al público. Para limitar el empleo de éstas, AIChE ha empleado la clasificación NFPA y las normas OSHA (se describen en el apartado *"Fuentes de consulta sobre riesgos químicos"*), si bien, es necesario tener en cuenta, que en Europa el reglamento REACH restringe la comercialización de determinadas sustancias químicas, catalogadas como de especialmente preocupantes por su potencialidad de causar daños al medioambiente o a la salud, por lo que además de la lista de sustancias prohibidas hay que tener en cuenta las sustancias cuya compra requiere una autorización especial, por estar clasificadas como especialmente preocupantes por el REACH, que no se podrán adquirir a menos que se tenga dicha autorización.

Estas son las restricciones basadas en la clasificación NFPA y OSHA.

- 2.1. No se permiten reacciones que involucren reactivos, intermedios o productos sujetos a reglamentación especial por la OSHA, ni con una toxicidad, reactividad o inflamabilidad NFPA de 4. Según la NFPA éstos incluyen aquellos materiales que, en sí mismos, son fácilmente capaces de detonación, descomposición explosiva o reacción explosiva a temperaturas y presiones normales.
- 2.2. La lista de productos prohibidos es:
  - Amianto,
  - sustancias volátiles del alquitrán de hulla,
  - 4-nitrobifenilo,
  - alfa-naftilamina,
  - metil éter de clorometilo,
  - 3,3 'diclorobencidina,



- éter bis-clorometílico,
  - beta-naftilamina,
  - bencidina,
  - 4-aminodifenilo,
  - etilenimina,
  - beta-propiolactona ,
  - 2-acetilaminofluoreno,
  - 4-dimethylaminoazo-benezene,
  - n-nitrosodimetilamina,
  - cloruro de vinilo,
  - arsénico inorgánico,
  - benceno,
  - 1,2-dibromo-3-cloropropano,
  - acrilonitrilo,
  - óxido de etileno,
  - formaldehído,
  - 4,4'-Metilenedianilina,
  - 1,3-butadieno,
  - Cloruro de metilo
  - peróxido de acetilo,
  - 3-bromopropina,
  - hidroperóxido de cumeno,
  - di-terc-butil-peróxido,
  - peróxido de dietilo,
  - peroxidicarbonato de diisopropilo,
  - o-dinitrobenceno,
  - divinil acetileno,
  - nitrito de etilo,
  - nitroglicerina,
  - nitrometano,
  - ácido peracético,
  - otros compuestos explosivos
- 2.3. Ningún producto químico, a excepción de los domésticos (bicarbonato de sodio, sal, etc) debe ser transportado en privado. El suministrador del producto químico lo transportará hasta la universidad.
- 2.4. Los productos químicos no deben almacenarse en otras instalaciones que no sean las habilitadas por la universidad para tal efecto, a excepción de los domésticos (bicarbonato de sodio, sal, etc).
- 2.5. En ningún caso la concentración de peróxido de hidrógeno puede superar el 30%, porque estas disoluciones son muy inestables y difíciles de manejar.

### **3. Requisitos de seguridad química del prototipo**

- 3.1. El prototipo no podrá emitir líquidos, olores desagradables, llamas ni humos visibles durante su funcionamiento normal. Estas emisiones sólo se permiten como consecuencia del accionamiento ocasional de un sistema de seguridad en caso de emergencia, para evitar la explosión del prototipo.
- 3.2. El prototipo puede llevar válvulas de alivio de presión, pero no se permite la emisión de gases a presión. Estas válvulas se accionarán sólo en caso de emergencia para evitar la explosión del reactor.
- 3.3. Los líquidos producidos en la reacción deberán ser recogidos o eliminados dentro del prototipo (por ejemplo, mediante un absorbedor, un tanque de retención,...)
- 3.4. No se permite la emisión de compuestos gaseosos con NFTA superior a 3 (por ejemplo H<sub>2</sub>S). Si la reacción produce algún compuesto de este tipo, ha de tratarse apropiadamente (por ejemplo mediante reacción catalítica) antes de su vertido.
- 3.5. Sólo se permiten prototipos con llama interna si el motor es un motor comercial de combustión interna. En este caso, ha de operar con un combustible alternativo sintetizado por el grupo de estudiantes, y presentar al menos un componente de diseño original añadido por el grupo de estudiantes. Además, el grupo ha de elaborar un breve procedimiento de seguridad para el funcionamiento y mantenimiento de este motor de combustión interna.
- 3.6. El ruido de los motores debe mantenerse por debajo de 90 dB (medido a una distancia de 1 metro).
- 3.7. Los contenedores de productos con NFTA igual o superior a 2 han de ir perfectamente anclados para evitar que vuelquen y su tapa ha de cerrar herméticamente, para impedir fugas.
- 3.8. Los químicos con NFTA igual o superior a 2 tampoco pueden adicionarse directamente al prototipo con un sistema abierto o con entidad diferente al prototipo. Deben emplearse sistemas cerrados de émbolo o tanques con válvula, en ambos casos conectados al prototipo, que permitan alimentar los caudales correspondientes a un tanque de mezcla o al reactor.
- 3.9. Contención Química Riesgos. Si durante el funcionamiento del prototipo se da la presencia de cualquier compuesto con una calificación de riesgo tóxico NFPA de 2 o más, ya sean disolventes, diluyentes de reactivos, reactivo, intermedio o producto, han de tomarse las medidas apropiadas durante la manipulación de estos productos químicos en el área de preparación de vehículos para evitar la exposición humana a estas sustancias químicas. Para ello es necesario consultar detenidamente y aplicar el apéndice B del documento de normas de seguridad del concurso (Safety Rules 2015): [http://www.aiche.org/sites/default/files/docs/pages/b\\_-\\_chem-e-car\\_safety\\_rules\\_regionals\\_2015.pdf](http://www.aiche.org/sites/default/files/docs/pages/b_-_chem-e-car_safety_rules_regionals_2015.pdf). Si estos productos químicos están presentes dentro del vehículo habrá que dotar al prototipo con un sistema de

doble contención evitar derrames y para reducir la exposición humana a las sustancias tóxicas.

3.9.1. **La contención primaria** debe ser capaz de evitar las fugas de productos químicos durante el transporte normal del prototipo y durante el funcionamiento del mismo. La tapa debe ser lo suficientemente robusta para evitar el escape de productos químicos, salvo un pequeño flujo, muy limitado, en condiciones de emergencia, como por ejemplo, en caso de vuelco o colisión. Todas las tapas de los recipientes que contienen productos químicos deben estar firmemente sujetas al mismo y deberán cubrir la totalidad de la abertura del recipiente. Cualquier agujero en la tapa debe ajustar perfectamente al elemento que vaya inserto en él (tubería de entrada o salida, válvula, indicadores, etc.) de forma sellada si es posible. Films de polímero, parafilm, papel de aluminio y materiales similares no se consideran adecuados como tapas o coberturas de recipientes.

3.9.2. **La contención secundaria** en el prototipo debe ser de la durabilidad y el tamaño adecuado para mantener el contenido de productos químicos derramados dentro del vehículo. Se requiere esta contención, además, para los productos químicos inflamables y reactivos.

#### 4. Seguridad de equipos a presión

4.1. Los recipientes y componentes a presión suponen un riesgo de explosión significativa debido a la energía sustancial contenida en dicha presión. Por lo tanto, los estudiantes deben demostrar a través de medidas de presión apropiadas que las presiones durante el funcionamiento normal del prototipo no exceden las especificaciones del equipo e instalar los sistemas de seguridad adecuados para evitar una explosión.

4.2. Se recomienda leer el Real Decreto 1388/2011, de 14 de octubre, por el que se dictan las disposiciones de aplicación de la Directiva 2010/35/UE del Parlamento Europeo y del Consejo de 16 de junio de 2010 sobre equipos a presión transportables. <http://www.boe.es/boe/dias/2011/10/15/pdfs/BOE-A-2011-16174.pdf>

4.3. La presión máxima de operación es la presión más alta dentro del depósito durante el funcionamiento normal. Para las etapas iniciales del diseño, esta presión puede estimarse a partir de la estequiometría de la reacción, la carga máxima del prototipo, y la distancia más larga que se contempla que pueda recorrer. Para estandarizar su cálculo, se define la presión máxima de operación como la presión necesaria para impulsar el prototipo una distancia de 30.48 m, cuando va cargado con 500 g de agua. Sin embargo, la presión real puede ser diferente, por lo que habrá que medirla durante el funcionamiento

del prototipo para comprobar que no supera el 90% de la estimada estequiométricamente.

- 4.4. Las siguientes restricciones se aplican a los prototipos que operan a presión, es decir a presión manométrica superior a 0.068 atm o 6,895 kPa (0.068 atm superior a la atmosférica, es decir, 1.068 atm cuando la presión atmosférica es de 1 atm).

4.3.1. **Indicador de Presión.** Todos los prototipos a presión deberán disponer de un indicador de presión que abarque un intervalo de medida mínimo desde 0 atm hasta el doble de la presión máxima de operación.

4.3.2. **Válvula de alivio de emergencia.** Todos los prototipos a presión deberán llevar instalada una válvula de alivio de emergencia estándar industrial. Ésta deberá estar tarada para abrirse a una presión de 1.1 veces la máxima presión de operación. El funcionamiento correcto de la válvula debe comprobarse y deben conservarse la documentación correspondiente que acredite su correcto funcionamiento.

El escenario de diseño de la válvula de alivio de emergencia debe especificarse claramente, indicado, por ejemplo, la cantidad y concentración de reactivo supuestas, la temperatura inicial, y cualquier error de funcionamiento considerado para el cálculo, tales como: sobrecarga del prototipo, uso de reactivo o concentración equivocado, etc. Además, los cálculos para el diseño de la válvula de alivio de emergencia se deben incluir en la documentación y deben ser revisados y aprobados por un profesor. Para el diseño y selección de la válvula, consultar el material que se ofrece en el artículo de Crowl y Tipler “Sizing Pressure Relief Valves”, de CEP, AIChE, disponible en: [http://www.aiche.org/sites/default/files/cep/20131068\\_r.pdf](http://www.aiche.org/sites/default/files/cep/20131068_r.pdf).

4.3.3. **Localización de la válvula de alivio de emergencia.** El dispositivo de alivio debe estar correctamente ubicado. La válvula de alivio debe estar situada en la parte superior del recipiente a presión sin ningún tipo de válvulas entre el recipiente y la válvula de alivio. La tubería que conecta la válvula de alivio con el recipiente debe ser lo más corta posible para evitar la caída de presión. Se debe tener en cuenta el arrastre de líquido o sólidos que puedan interferir con el buen funcionamiento de la válvula.

4.3.4. **Certificación de los dispositivos a presión.** Todos los componentes, incluso los recipientes, tuberías y accesorios, válvulas, manómetros, filtros, deben estar certificados para operar a una presión mayor que la presión máxima de operación del

prototipo. Esta información debe ser proporcionada en el paquete de documentación de ingeniería. Las especificaciones de presión de la mayoría de los componentes se pueden obtener directamente del fabricante. Sin embargo, es posible que la certificación de presión de los recipientes, no se pueda obtener de esta forma. En este caso, ha de probarse el recipiente a presión superior a la presión máxima de operación y registrar el resultado, siguiendo un protocolo de experimentación normalizado. Véase en el Apéndice A de las reglas de seguridad ([http://www.aiche.org/sites/default/files/docs/pages/b - chem-e-car safety rules regionals 2015.pdf](http://www.aiche.org/sites/default/files/docs/pages/b-chem-e-car-safety-rules-regionals-2015.pdf)) el Procedimiento y Protocolo de Prueba de Recipientes a Presión.

- 4.3.5. **Sistema de gestión adecuada para evitar el exceso o defecto de carga.** La presión de trabajo máxima depende de la cantidad de reactivo o reactivos cargada. Los estudiantes deben demostrar que el prototipo cuenta con los controles y sistemas de gestión adecuados para asegurar que se carga la cantidad adecuada de reactivo en el vehículo. Para tal fin se incluye en esta guía una serie de recomendaciones:
- 4.3.5.1. La cantidad a cargar será acordada por todos los miembros del equipo y debe ser respaldada por los resultados de las pruebas de funcionamiento.
  - 4.3.5.2. El volumen máximo de carga admisible debe estar indicada en todos los dispositivos de medida de cantidad de reactivo, tales como probetas, vasos de precipitados, etc.
  - 4.3.5.3. Al menos un miembro del equipo, diferente al que esté realizando la carga del prototipo, debe supervisar que esta operación se lleva a cabo adecuadamente.
  - 4.3.5.4. Una vez completada la carga, se debe marcar o etiquetar el vehículo de tal forma que esta marca permanezca hasta que finalice la reacción.
- 4.3.6. **Materiales no permitidos.** Los recipientes o tuberías utilizadas para gases a presión no pueden ser de PVC, cPVC ni polietilentereftalato (PETE o PET). Todos estos tipos de plásticos tienen defectos microscópicos que pueden ocasionar fallos debido a la tensión tangencial.
- 4.3.7. **Prototipos que requieran hidrógeno.** Todos los vehículos que requieran una alimentación externa de hidrógeno para funcionar, han de contar con una conexión rápida macho de latón 1/4" de SESO (Single End Shutoff), como la que se muestra en la figura 1. Las juntas

tóricas para mantener la estanqueidad y evitar fugas de hidrógeno han de ser de caucho de nitrilo (BUNA N).

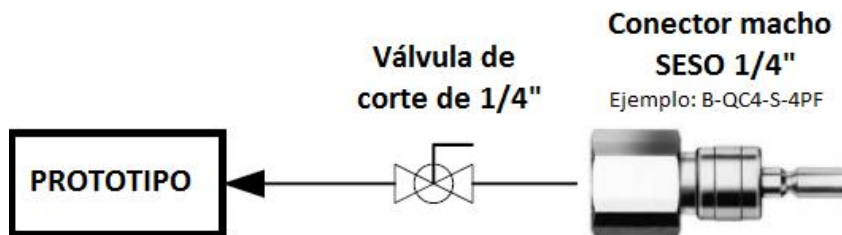


Figura 1. Conexión para el suministro de hidrógeno.

## 5. Riesgos debidos a la temperatura

5.1. Todas las superficies expuestas del prototipo con temperaturas bajo cero o superiores a 65°C deben estar bien aisladas o cubiertas para evitar el contacto con la piel humana.

## 6. Riesgos eléctricos

6.1. Todo el cableado y componentes eléctricos expuestos deben estar aislados eléctricamente o cubiertos para evitar la posibilidad de cortocircuito, descarga eléctrica y de ignición de cualquier componente del prototipo. No se permite el uso de pinzas de cocodrilo ni cables trenzados, ya que representan tanto un peligro de descarga eléctrica como una fuente de ignición de líquidos o vapores inflamables. Han de emplearse conectores eléctricos más robustos, tales como clavijas de banana o bornes.

6.2. Se aconseja consultar la guía del INSHT para la evaluación y prevención de riesgos eléctricos, que se descarga gratuitamente en el siguiente enlace: [http://www.insht.es/InshtWeb/Contenidos/Normativa/GuiasTecnicas/Ficheros/g\\_electr.pdf](http://www.insht.es/InshtWeb/Contenidos/Normativa/GuiasTecnicas/Ficheros/g_electr.pdf)

## 7. Riesgos mecánicos

7.1. El prototipo debe estar provisto de todos los elementos de protección necesarios para evitar que las partes móviles expuestas, como son correas, cadenas, engranajes, conexiones, etc. causen daño alguno a las personas.

## 8. Riesgos por oxígeno

8.1. Los gases ricos en oxígeno, presentan un riesgo potencial de explosión por dos razones. En primer lugar, el oxígeno puede reaccionar violentamente con materiales combustibles, incluyendo cualquier hidrocarburos gaseosos o residuos líquidos, papel, filtros, empaquetaduras o asientos de las válvulas,

componentes del regulador y juntas tóricas. En segundo lugar, las pequeñas partículas de metal, siempre presentes en los componentes de metal, pueden acelerarse durante el flujo de gas, chocar contra una superficie y proporcionar una fuente de ignición suficiente para la combustión de la partícula de metal. Para profundizar sobre este tipo de riesgos y cómo evitarlos se aconseja consultar el documento: Safety Standard for Oxygen and Oxygen Systems (NASA, 1996), disponible en el enlace: <http://www.hq.nasa.gov/office/codeq/doctree/canceled/1740151.pdf>.

8.2. Los prototipos que involucren gases enriquecidos en oxígeno deben cumplir las siguientes normas de seguridad:

8.2.1. **Requisitos de los componentes.** Todos los componentes del prototipo que trabajen con el gas enriquecido en oxígeno deben estar clasificados por el fabricante como aptos para trabajar con oxígeno. Esto incluye recipientes, tuberías, filtros, reguladores y válvulas. Se prefiere que estos componentes sean metálicos ya que los materiales no metálicos son más propensos a reaccionar con el oxígeno.

8.2.2. **Limpieza de los componentes.** Todos los componentes del prototipo que trabajen con el gas enriquecido en oxígeno deben estar perfectamente limpios antes de entrar en funcionamiento con el gas enriquecido en oxígeno. La limpieza deberá asegurar:

8.2.2.1. La eliminación de partículas, películas, grasas, aceites y otras sustancias no deseadas.

8.2.2.2. que la herrumbre suelta, el óxido, la suciedad, las cascarillas de laminación, las salpicaduras de soldadura, y partículas de soldadura depositadas en partes móviles y estacionarias no interfieran en el correcto funcionamiento de los componentes y no obstruyen ningún conducto.

8.2.2.3. Que se minimiza la cantidad de contaminantes finamente divididos, ya que éstos son mucho más propensos a la ignición que el mismo material a granel.

La limpieza del sistema de oxígeno debe realizarse meticulosamente, desmontando todas las piezas que lo componen para limpiarlas individualmente.

Las disoluciones de limpieza utilizadas dependen del material a limpiar. Los aceros inoxidables de la serie (300), las aleaciones Monel®, las aleaciones Inconel, y el Teflon® se limpian por lo general mediante el empleo de una solución alcalina seguido del enjuague en una solución ácida. El acero al carbono se limpia empleando un producto específico para la eliminación de óxido y herrumbre, seguido del empleo de una solución alcalina. En casos graves de oxidación o corrosión, el acero al carbono puede limpiarse

empleando arena o microesferas de vidrio. El cobre y el latón se limpian en una solución alcalina, y a continuación, se realiza un decapado ácido. El aluminio y otros materiales no metálicos se limpian con detergente líquido.

- 8.2.3. **Los componentes no deben haber sido utilizados previamente para otro tipo de servicio con otros compuestos diferentes al oxígeno.** Los usos anteriores pueden contaminar el componente con residuos de hidrocarburos, por ejemplo. En particular, los reguladores de gas utilizados para el suministro de hidrocarburos son muy propensos a explotar cuando se colocan en una línea de oxígeno.

## 9. Riesgos Biológicos

- 9.1. Si se utilizan microorganismos durante cualquier fase del diseño, desarrollo, operación, o preparación del prototipo, éstos deben estar clasificados con una peligrosidad biológica no superior a 1 (o nivel de bioseguridad 1). Esta exigencia incluye a cualquier, hongo, virus, bacteria o levadura. Los microorganismos de nivel de bioseguridad 1 son adecuados para el trabajo, porque están perfectamente caracterizados y se tiene la seguridad de que no causan sistemáticamente la enfermedad en humanos adultos sanos, y su peligro potencial es mínimo para el personal de laboratorio y el medio ambiente. No requieren el aislamiento del laboratorio. El trabajo se lleva a cabo generalmente en encimeras abiertas utilizando los métodos microbiológicos estándar. No es necesario, ni se usa generalmente, ningún equipo especial de contención ni diseños especiales de las instalaciones. Las prácticas microbiológicas estándar propias del nivel de riesgo biológico 1, incluyen el uso de dispositivos mecánicos de pipeteo, es decir, la prohibición de pipetear aspirando con la boca de la pipeta, la prohibición de comer, beber o fumar en el laboratorio, y el requisito de lavarse las manos aplicable a todas las personas cuando terminan su trabajo o al salir del laboratorio. Las personas que trabajan en el laboratorio deben usar una bata de laboratorio para proteger su ropa. Se recomienda usar guantes al manipular estos agentes biológicos. Como equipo de protección adicional se incluyen gafas para la protección de los ojos y opcionalmente un escudo antisalpicaduras o máscara de protección. Todos los procedimientos deben realizarse con cuidado para minimizar la generación de salpicaduras o aerosoles.
- 9.2. El lavado de manos es una de las medidas de protección más importantes para evitar la salida de agentes biológicos no deseados del laboratorio. Se recomienda usar jabón líquido, frotar las manos durante al menos veinte segundos para la formación de espuma. De este modo se asegura la eliminación eficaz de la mayor parte de estos agentes biológicos.



9.3. Todos los residuos regulados, como son: cultivos, medios de cultivo, y otros desechos regulados, deben ser recogidos, empaquetados y descontaminados de acuerdo a las regulaciones locales, autonómicas y nacionales.

9.4. Para mayor detalle sobre los riesgos biológicos consultar la guía técnica de accidentes y riesgos biológicos, elaborada por el Instituto Nacional de Seguridad e Higiene en el Trabajo (INSHT) que se descarga gratuitamente en: [http://www.insht.es/InshtWeb/Contenidos/Normativa/GuiasTecnicas/Ficheros/agen\\_bio.pdf](http://www.insht.es/InshtWeb/Contenidos/Normativa/GuiasTecnicas/Ficheros/agen_bio.pdf)

## **FUENTES DE CONSULTA SOBRE RIESGOS QUÍMICOS**

### **1. Hojas de seguridad de productos químicos**

Los fabricantes de productos químicos han de entregar con el producto, o bien facilitar el acceso, a las hojas de seguridad de los productos químicos fabricados. En dichas hojas de seguridad se especifican los distintos riesgos del producto químico y las recomendaciones de seguridad para su manipulación. Por lo tanto, han de leerse detenidamente las hojas de seguridad de todos los productos químicos que se empleen y seguir correctamente las recomendaciones de seguridad dadas por el fabricante.

### **2. NFPA**

El método de clasificación empleado por la NFPA (National Fire Protection Association) asigna un valor numérico al grado de riesgo en función de tres características: la toxicidad, la inflamabilidad y la inestabilidad o reactividad. Los valores numéricos van de 0 a 4, donde 0 representa el menor grado de peligro y 4 el más alto. Se recomienda visitar la página [www.nfpa.org](http://www.nfpa.org) para más detalles.

### **3. Guía de bolsillo sobre peligros químicos**

La guía de bolsillo sobre peligros químicos es también una fuente de información muy completa y sencilla de emplear sobre la peligrosidad de los diferentes compuestos químicos y las medidas de protección necesarias. Se puede descargar gratuitamente en el enlace: <http://www.cdc.gov/niosh/docs/2005-149/pdfs/2005-149.pdf>

### **4. Guía técnica, del INSHT, para la evaluación y prevención de los riesgos relacionados con agentes químicos**

La guía técnica para la evaluación y prevención de los riesgos relacionados con agentes químicos, del INSHT es de gran ayuda, ya que incluye criterios y recomendaciones que pueden facilitar a todos los miembros del grupo de trabajo el cumplimiento de las normas de seguridad, especialmente en lo que se refiere a la evaluación de riesgos

para la salud y a las medidas preventivas aplicables. Además incluye información útil para aplicar las medidas de seguridad en el propio diseño del prototipo como, por ejemplo, recomendaciones para el diseño de contenedores de compuestos químicos peligrosos. La guía se puede descargar gratuitamente en el enlace: [http://www.insht.es/InshtWeb/Contenidos/Normativa/GuiasTecnicas/Ficheros/g\\_AQ.pdf](http://www.insht.es/InshtWeb/Contenidos/Normativa/GuiasTecnicas/Ficheros/g_AQ.pdf).

#### **5. REACH: Reglamento europeo relativo al registro, la evaluación, la autorización y la restricción de las sustancias y mezclas químicas**

Este Reglamento tiene como objetivo garantizar un alto nivel de protección de la salud humana y el medio ambiente y supone una reforma total del marco legislativo sobre sustancias y mezclas químicas en la Unión Europea. El REACH obliga a registrar todas las sustancias químicas que se comercializan dentro del territorio de la Unión Europea, de forma que no se puede comercializar ninguna sustancia que no se encuentre registrada. El reglamento diferencia entre sustancias no preocupantes, preocupantes, altamente preocupantes y sustancias candidatas a ser incluidas como preocupantes o altamente preocupantes.

## ANEXO 6

# SELECCIÓN DE MATERIALES Y REQUISITOS MEDIOAMBIENTALES

# Selección de materiales y requisitos medioambientales para el diseño de los componentes de un prototipo para la competición Chem-E-Car

Profesores:

Sonia Mato Díaz

Germán Alcalá Penadés

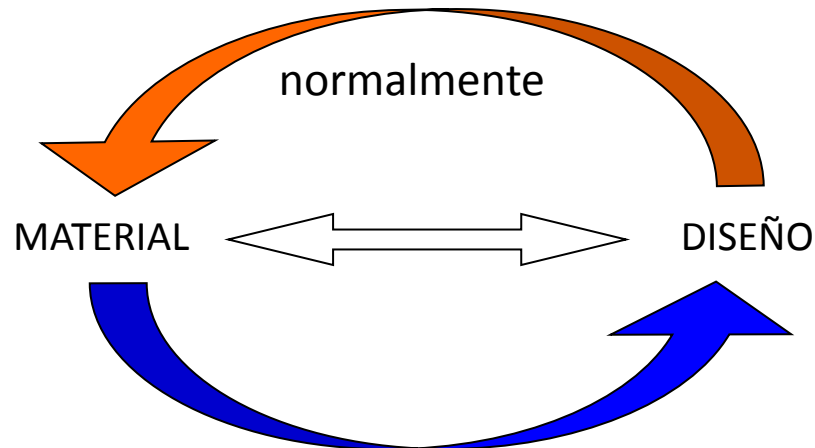
F. Javier Pérez Trujillo

# Selección de materiales en el proceso de diseño

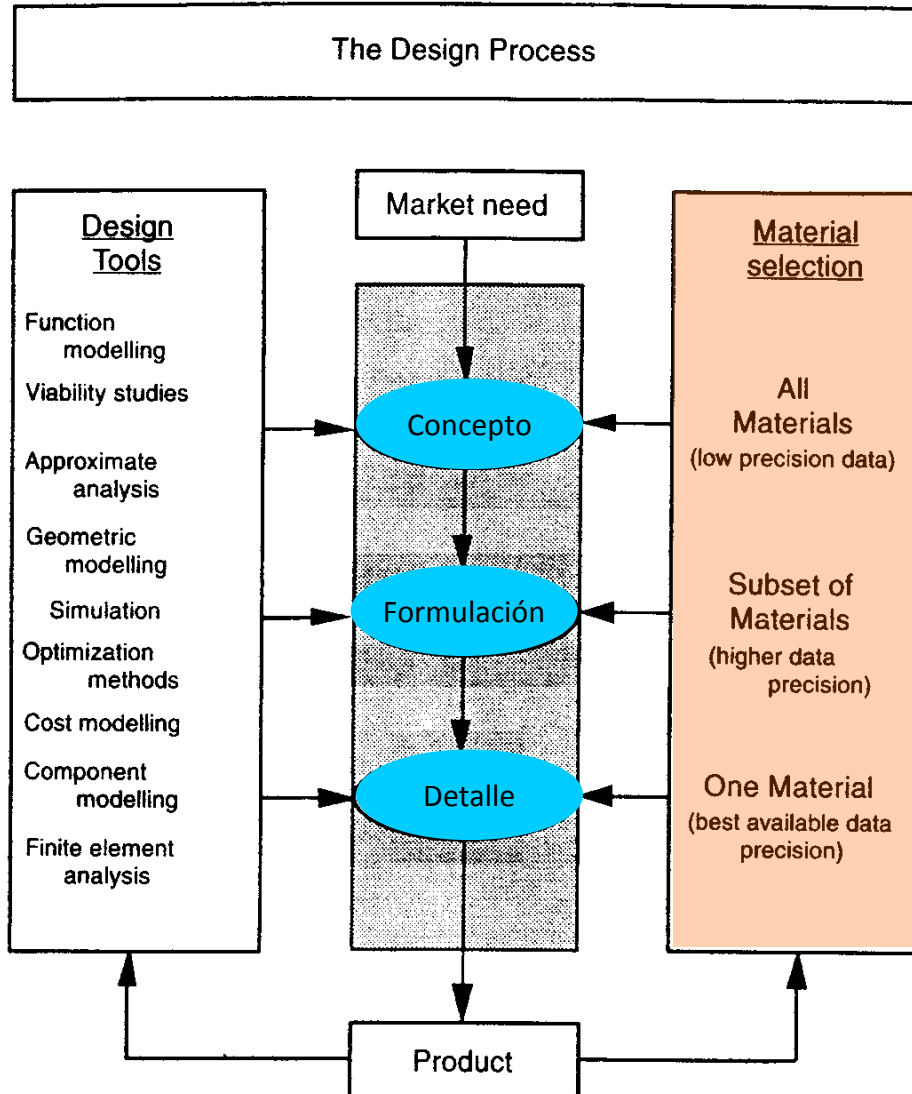
## DISEÑO

Proceso de trasladar una idea nueva o necesidad en información detallada para la fabricación de un componente.

Cada etapa del diseño requiere **decisiones** acerca de los **materiales** con los que se fabricará el componente y los **procesos** de fabricación



# Selección de materiales en el proceso de diseño



# Selección y diseño de materiales

- Más de 160000 materiales disponibles →  
¿cómo elegir el material apropiado?
- Material elegido condicionado por:
  - cumplimiento de objetivos →
    - **Factores físicos:** tamaño, forma y peso
    - **Factores mecánicos:** propiedades mecánicas
  - coste mínimo y disponibilidad,
  - durabilidad,
  - implicaciones medioambientales y de seguridad.



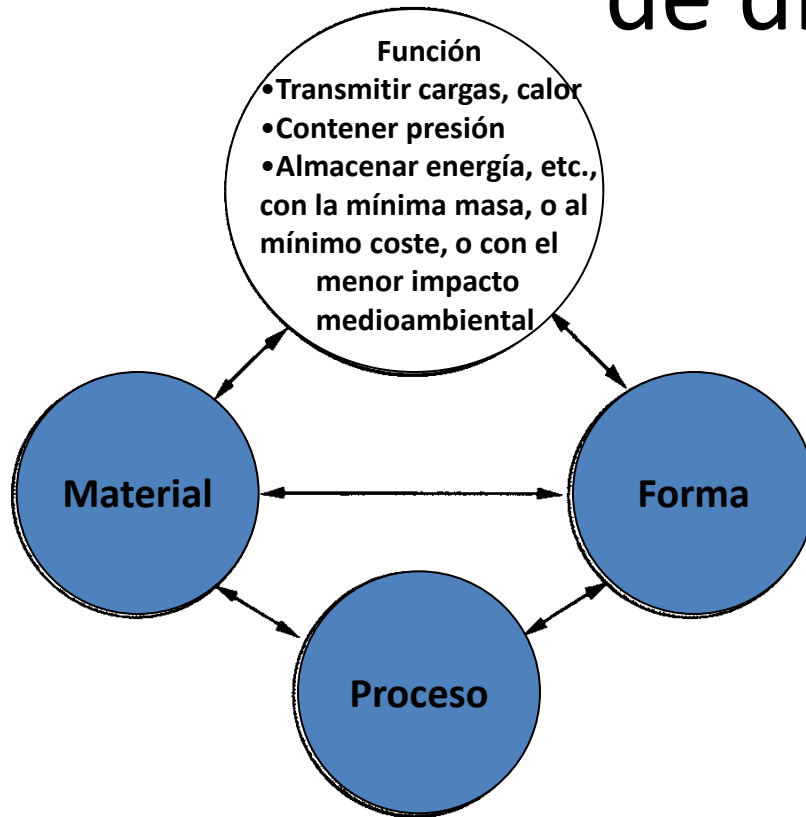
# Selección y diseño de materiales



- A veces la solución no es única → se necesita un amplio conocimiento de los materiales y sus propiedades, así como un procedimiento de selección sistemático → herramientas informáticas → ***CES materials***



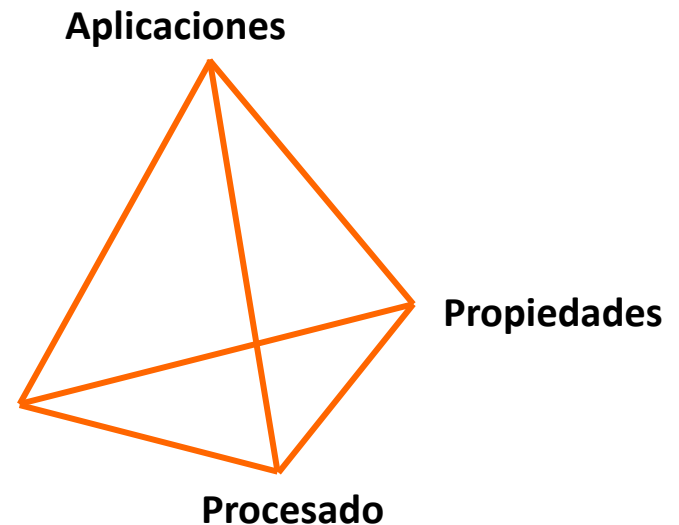
# Selección de materiales en el proceso de diseño



La selección del material y el proceso no es independiente de la forma del producto (macro, micro)

¿Qué es PROPIEDAD?  
¿Qué es ESTRUCTURA?

Estructura



# Ciencia e ingeniería de materiales

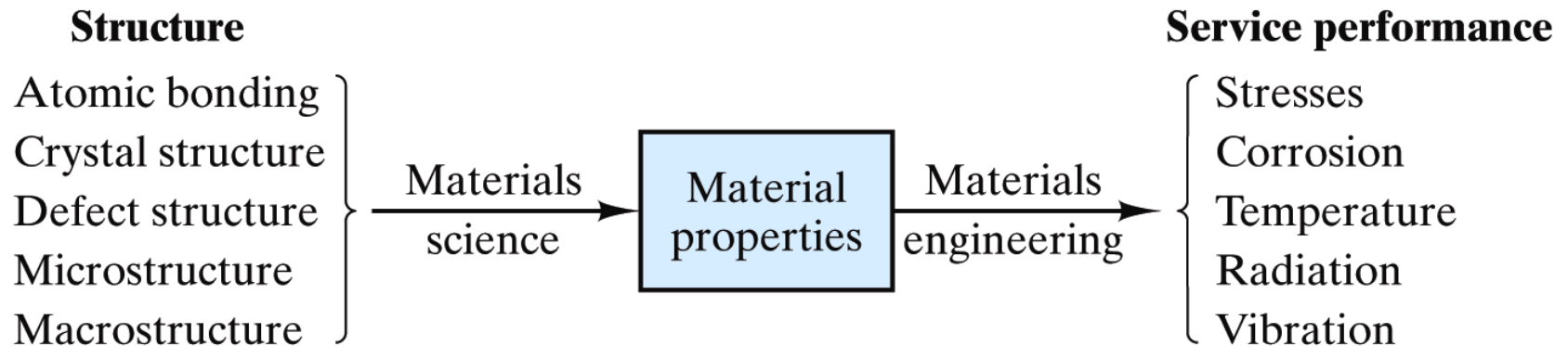
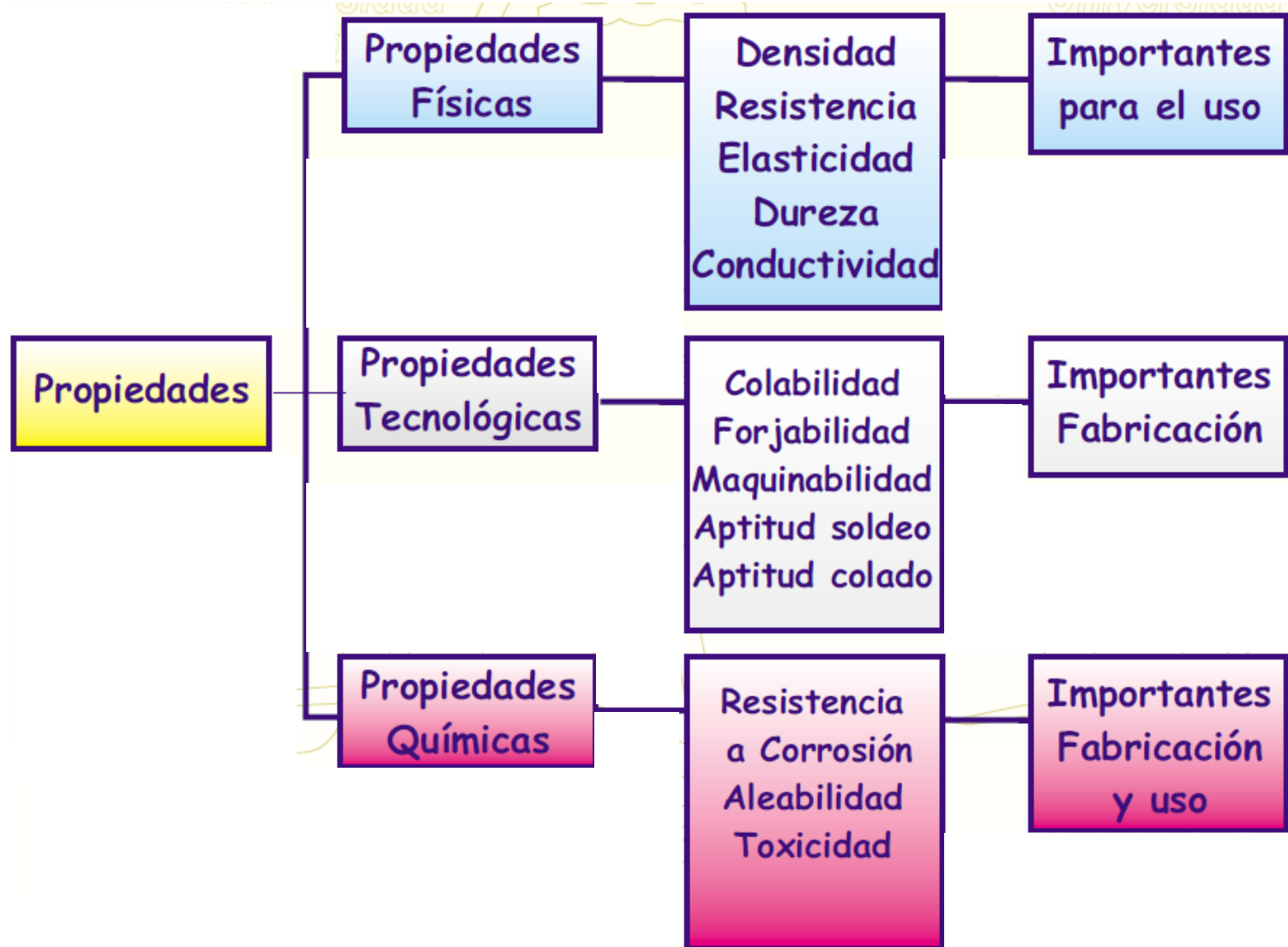


Figure 20.2

*Schematic illustration of the central role played by properties in the selection of materials. Properties are a link between the fundamental issues of materials science and the practical challenges of materials engineering. (From G. E. Dieter, in ASM Handbook, Vol. 20: Materials Selection and Design, ASM International, Materials Park, OH, 1997, p. 245.)*

# Criterios de selección: propiedades



# Materials disponibles

**Metals,  
alloys**



**Polymers,  
elastomers**



**Ceramics,  
glasses**



**Hybrids,  
composites**

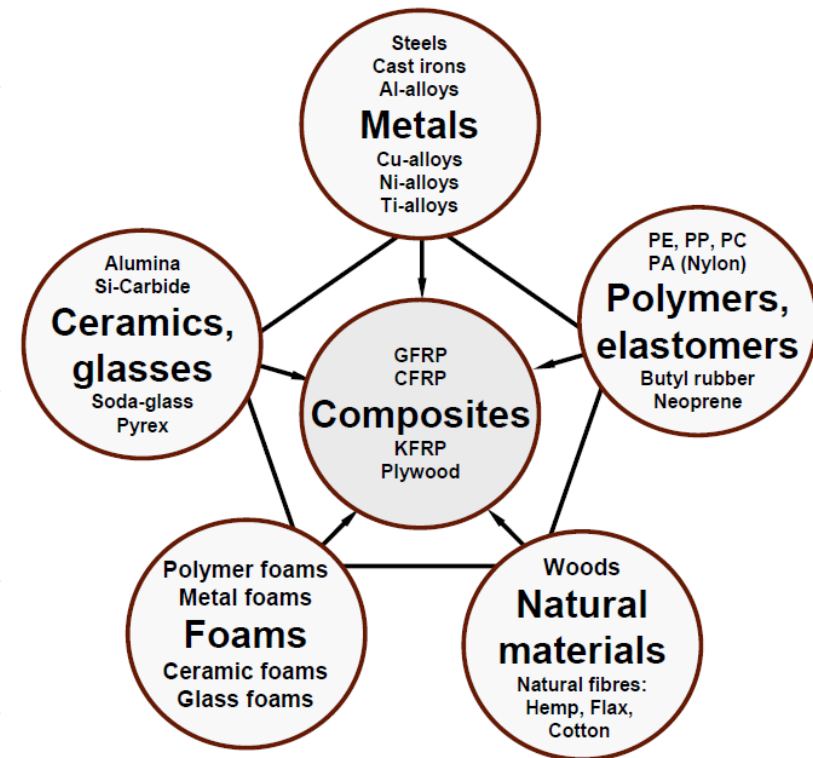


# Materiales disponibles

Tabla 1.2 Tipos de materiales.

Metales y aleaciones	Hierro y aceros Aluminio y sus aleaciones Cobre y sus aleaciones Níquel y sus aleaciones Titanio y sus aleaciones
Polímeros	Poliétileno (PE) Polimetacrilato de metilo (PMMA) Poliámidas –nylon– (PA) Poliestireno (PS) Poliuretano (PU) Policloruro de vinilo (PVC) Politereftalato de etilenglicol (PET) Polieterecetona (PEEK) Resinas epoxi (EP) Elastómeros, como el caucho natural (NR)
Cerámicos y vidrios*	Alúmina –esmeril, zafiro– ( $\text{Al}_2\text{O}_3$ ) Magnesia ( $\text{MgO}$ ) Sílice ( $\text{SiO}_2$ ), vidrio y silicatos Carburo de silicio ( $\text{SiC}$ ) Nitruro de silicio ( $\text{Si}_3\text{N}_4$ ) Cemento y hormigón
Materiales compuestos	Polímeros reforzados con fibra de vidrio (GFRP) Polímeros reforzados con fibras de carbono (CFRP) Polímeros cargados Cermets
Materiales naturales	Madera Piel Algodón, lana, seda Hueso

\*Las cerámicas son cristalinas, inorgánicas, no metálicas. Los vidrios son sólidos no cristalinos (o *amorfos*). La mayoría de los vidrios para ingeniería son no metálicos, pero hoy existe un gran número de vidrios metálicos con propiedades útiles.



# Materiales disponibles: aceros

## **Appendix C-4a** *Mechanical Properties of Selected Carbon and Alloy Steels*

I: AISI Number <sup>a</sup>	Treatment	Tensile Strength		Yield Strength		Elongation (%)	Reduction in Area (%)	Brinell Hardness, $H_B$	Izod Impact Strength	
		MPa	ksi	MPa	ksi				J	ft · lb
1015	As-rolled	420.6	61.0	313.7	45.5	39.0	61.0	126	110.5	81.5
	Normalized	424.0	61.5	324.1	47.0	37.0	69.6	121	115.5	85.2
	Annealed	386.1	56.0	284.4	41.3	37.0	69.7	111	115.0	84.8
1020	As-rolled	448.2	65.0	330.9	48.0	36.0	59.0	143	86.8	64.0
	Normalized	441.3	64.0	346.5	50.3	35.8	67.9	131	117.7	86.8
	Annealed	394.7	57.3	294.8	42.8	36.5	66.0	111	123.4	91.0
1030	As-rolled	551.6	80.0	344.7	50.0	32.0	57.0	179	74.6	55.0
	Normalized	520.6	75.5	344.7	50.0	32.0	60.8	149	93.6	69.0
	Annealed	463.7	67.3	341.3	49.5	31.2	57.9	126	69.4	51.2
1040	As-rolled	620.5	90.0	413.7	60.0	25.0	50.0	201	48.8	36.0
	Normalized	589.5	85.5	374.0	54.3	28.0	54.9	170	65.1	48.0
	Annealed	518.8	75.3	353.4	51.3	30.2	57.2	149	44.3	32.7
1050	As-rolled	723.9	105.0	413.7	60.0	20.0	40.0	229	31.2	23.0
	Normalized	748.1	108.5	427.5	62.0	20.0	39.4	217	27.1	20.0
	Annealed	636.0	92.3	365.4	53.0	23.7	39.9	187	16.9	12.5
1095	As-rolled	965.3	140.0	572.3	83.0	9.0	18.0	293	4.1	3.0
	Normalized	1013.5	147.0	499.9	72.5	9.5	13.5	293	5.4	4.0
	Annealed	656.7	95.3	379.2	55.0	13.0	20.6	192	2.7	2.0
1118	As-rolled	521.2	75.6	316.5	45.9	32.0	70.0	149	108.5	80.0
	Normalized	477.8	69.3	319.2	46.3	33.5	65.9	143	103.4	76.3
	Annealed	450.2	65.3	284.8	41.3	34.5	66.8	131	106.4	78.5

# Materiales disponibles: aceros

### Appendix C-4a (continued)

I: AISI Number <sup>a</sup>	Treatment	Tensile Strength		Yield Strength		Elongation (%)	Reduction in Area (%)	Brinell Hardness, $H_B$	Izod Impact Strength	
		MPa	ksi	MPa	ksi				J	ft · lb
3140	Normalized	891.5	129.3	599.8	87.0	19.7	57.3	262	53.6	39.5
	Annealed	689.5	100.0	422.6	61.3	24.5	50.8	197	46.4	34.2
4130	Normalized	668.8	97.0	436.4	63.3	25.5	59.5	197	86.4	63.7
	Annealed	560.5	81.3	360.6	52.3	28.2	55.6	156	61.7	45.5
4140	Normalized	1020.4	148.0	655.0	95.0	17.7	46.8	302	22.6	16.7
	Annealed	655.0	95.0	417.1	60.5	25.7	56.9	197	54.5	40.2
4340	Normalized	1279.0	185.5	861.8	125.0	12.2	36.3	363	15.9	11.7
	Annealed	744.6	108.0	472.3	68.5	22.0	49.9	217	51.1	37.7
6150	Normalized	939.8	136.3	615.7	89.3	21.8	61.0	269	35.5	26.2
	Annealed	667.4	96.8	412.3	59.8	23.0	48.4	197	27.4	20.2
8650	Normalized	1023.9	148.5	688.1	99.8	14.0	40.4	302	13.6	10.0
	Annealed	715.7	103.8	386.1	56.0	22.5	46.4	212	29.4	21.7
8740	Normalized	929.4	134.8	606.7	88.0	16.0	47.9	269	17.6	13.0
	Annealed	695.0	100.8	415.8	60.3	22.2	46.4	201	40.0	29.5
9255	Normalized	932.9	135.3	579.2	84.0	19.7	43.4	269	13.6	10.0
	Annealed	774.3	112.3	486.1	70.5	21.7	41.1	229	8.8	6.5

<sup>a</sup> All grades are fine-grained except for those in the 1100 series, which are coarse-grained. Heat-treated specimens were oil-quenched unless otherwise indicated.

*Note:* Values tabulated are approximate median expectations for 1-in. round sections. Individual test results may differ considerably.

Source: ASM Metals Reference Book, American society for Metals, Metals Park, Ohio, 1981.



# Materiales disponibles: aceros

### Appendix C-8 Mechanical Properties of Some Wrought Stainless Steels (Approximate Median Expectations)

AISI Type	Ultimate Strength, $S_u$ (ksi)			Yield Strength $S_y$ (ksi)			Elongation (%)			Izod Impact (ft · lb)			Drawability	Machinability	Weldability	Typical Uses
	An.	CW	H&T	An.	CW	H&T	An.	CW	H&T	An.	CW	H&T				
<b>Austenitic</b>																
302	85	110		35	75		60	35		110	90		VG	P	G	General purpose; springs
303	90	110		35	80		50	22		85	35		G	G	P	Bolts, nuts, rivets, aircraft fittings
304	85	110		35	75		60	55		110	90		VG	P	G	General purpose; welded construction
310, 310S	95			45			50			110			G	P	G	Turbine, furnace, heat exchanger parts
347, 348	90	110		35	65		50	40		110			VG	P	G	Jet engine, nuclear energy parts
384 (wire)	75			35			55						E			Severely cold-worked parts; fasteners
<b>Martensitic</b>																
410	75	105	115	40	85	85	35	17	23	90	75	80	F	F–	F	Machine parts, shafts, bolts, cutlery
414	115	130 <sup>a</sup>	160	90	110 <sup>a</sup>	125	20	15 <sup>a</sup>	17	50		45		F	F	Machine parts, springs, bolts, cutlery
416, 416Se	75	100 <sup>b</sup>	110	40	85 <sup>b</sup>	85	30	13 <sup>b</sup>	18	70	20 <sup>b</sup>	25	P	G	P	Cutlery, fasteners, tools, screw machine parts
431	125	130 <sup>a</sup>	165	95	110 <sup>a</sup>	125	20	15 <sup>a</sup>	17	50		40		P–	F	High-strength bolts, aircraft fittings
440 A,B,C	105	115 <sup>a</sup>	260	60	90 <sup>a</sup>	240	14	7 <sup>a</sup>	3	2	2 <sup>a</sup>	2		VP	P	Balls, bearing parts, nozzles, cutlery (highest H&T hardness of any stainless)
<b>Ferritic</b>																
430, 430F	75	83		43	63		27	20					G	F–G	F	Decorative trim, mufflers, screw machine parts
446	83	85		53	70		23	20		2			P	F	F	Parts subjected to high-temperature corrosion

<sup>a</sup> Annealed and cold-drawn.<sup>b</sup>Tempered and cold-drawn.

Note: An., CW, H&T mean annealed, cold-worked, and hardened and tempered, respectively.

E, VG, G, F, P, VP mean excellent, very good, good, fair, poor, very poor, respectively.

Sources: *Metal Progress Databook 1980*, American Society for Metals, Metals Park, Ohio, Vol. 118, No. 1 (mid-June 1980); *ASME Handbook Metal Properties*, McGraw-Hill, New York, 1954; *Materials Engineering*, 1981 Materials Selector Issue, Penton/IPC, Cleveland, Vol. 92, No. 6 (Dec. 1980); *Machine Design*, 1981 Materials Reference Issue, Penton/IPC, Cleveland, Vol. 53, No. 6 (March 19, 1981).



# Materiales disponibles: aleaciones de cobre

## **Appendix C-13** *Mechanical Properties of Some Copper Alloys*

				Tensile Strength				Elongation in 2 in. (%)
			Ultimate, $S_u$		Yield, $S_y$			
Alloy	UNS Designation	Composition	ksi	MPa	ksi	MPa		
↑ Wrought Alloys ↓	Leaded beryllium copper	C17300	68–200	469–1379	25–178	172–1227	43–3	
	Med leaded brass	C34000	(65Cu–34Zn)	50–55	345–379	19–42	131–290	60–40
	Free cutting brass	C36000		49–68	338–469	18–45	124–310	53–18
	Leaded phos bronze	C54400	(88Cu–4Zn)	68–75	469–517	57–63	393–434	20–15
	Aluminum silicon-bronze	C64200	(91Cu–7Al–2Si)	75–102	517–703	35–68	241–469	32–22
	Silicon bronze	C65500	(97Cu–3Si)	58–108	400–745	22–60	152–414	60–13
	Manganese bronze	C67500		65–84	448–579	30–60	207–414	33–19
↑ Cast Alloys ↓	Leaded red brass	C83600	(85Cu–5Zn–5Sn–5Pb)	37	255	17	117	30
	Leaded yellow brass	C85200		38	262	13	90	35
	Manganese bronze	C86200		95	655	48	331	20
	Navy M bronze	C92200		40	276	20	138	30
	Leaded Ni–Sn bronze	C92900		47	324	26	179	20
	Bearing bronze	C93200		35	241	18	124	20
	Aluminum bronze	C95400		85–105	586–724	35–54	241–372	18–8
	Copper nickel	C96200	(90Cu–10Ni)	45	310	25	172	20

Note: Values tabulated are approximate median expectations.

Source: *Machine Design*, 1981 Materials Reference Issue, Penton/IPC, Cleveland, Vol. 53, No. 6 (March 19, 1981).

# Materiales disponibles: aleaciones de magnesio

## **Appendix C-14** *Mechanical Properties of Some Magnesium Alloys*

Alloy	Form	Tensile Strength				Elongation in 2 in. (%)
		Ultimate, $S_u$		Yield, $S_y$		
		ksi	MPa	ksi	MPa	
AZ91B-F	Die casting	34	234	23	159	3
AZ31B-F	Extrusion	38–53	262–365	28–44	193–303	11–15
ZK60A-T5	Forging	34–50	234–345	22–39	152–269	6–11
AZ31B-F						
HM21A-T5						
AZ80A-T5						
ZK60A-T6	Sheet, plate	33–42	228–290	21–32	145–221	9–21
AZ31B-H24						
HK31A-H24						
HM21A-T8						

*Note:* Values tabulated are approximate median expectations.

*Source:* *Machine Design*, 1981 Materials Reference Issue, Penton/IPC, Cleveland, Vol. 53, No. 6 (March 19, 1981).

# Materiales disponibles: aleaciones de níquel

## Appendix C-15 Mechanical Properties of Some Nickel Alloys

Alloy	Form	Tensile Strength				Creep Strength, 0.0001 %/h		Elongation in 2 in. (%)	Impact Strength Notched Charpy	
		Ultimate, $S_u$		Yield, $S_y$					ft · lb	J
		ksi	MPa	ksi	MPa	ksi	MPa			
Wrought nickel Duranickel 301	CD annealed bar	55–80	379–552	15–30	103–207	12	83	55–40	228	309
	CD annealed bar	90–120	621–827	30–60	207–414			55–35		
	CD aged bar	170–210	1172–1448	125–175	862–1207			25–15		
Monel 400	Annealed bar	70–90	483–621	25–50	173–345	24	165	60–35	216	293
	Hot-rolled bar	80–110	552–758	40–100	276–690	25	172	60–30	219	297
Monel K-500	Aged bar	140–190		110–150		87		30–20	39	53
Hastelloy B <sup>a</sup>	As-cast bar	134	924	67	462			52		
Udimet HX <sup>a</sup>	Sheet (0.109 in.)	114 (70°F)	786	52 (70°F)	359			43 (70°F)		
Unitemp HK <sup>a</sup>		13 (2000°F)	89	8 (2000°F)	55			50 (2000°F)		
Hastelloy X <sup>a</sup>										
Rene 95 <sup>a</sup>	Forging	235 (70°F)	1620	190 (70°F)	1310			15 (70°F)		
		225 (1000°F)	1551	182 (1000°F)	1255			13 (1000°F)		
Inconel 600 <sup>a</sup>	Annealed bar	96 (70°F)	662	41 (70°F)	283	40 (800°F)	276	45 (70°F)	180	244
		37 (1400°F)	255	25 (1400°F)	172	2.0 (1600°F)	14	68 (1400°F)		
Inconel 625 <sup>a</sup>	Annealed bar	140 (70°F)	965	71 (70°F)	490	12 (1400°F)	83	50 (70°F)	49	66
		78 (1400°F)	538	61 (1400°F)	421	3.9 (1600°F)	27	45 (1400°F)		
Inconel X-750 <sup>a</sup>	Aged bar	184 (70°F)	1269	126 (70°F)	869	63 (1200°F)	434	25 (70°F)	37	50
		143 (1200°F)	986	110 (1200°F)	758			7 (1200°F)		
Incoloy 800 <sup>a</sup>	Annealed bar	87 (70°F)	600	43 (70°F)	296	6.0 (1400°F)	41	44 (70°F)	107	145
		33 (1400°F)	228	23 (1400°F)	159	3.5 (1600°F)	24	84 (1400°F)		

<sup>a</sup>“Superalloys,” noted for high-temperature strength and corrosion resistance. Used in jet engines, turbines, and furnaces.

*Note:* Values tabulated are approximate median expectations. CD means cold-drawn.

Source: *Machine Design*, 1981 Materials Reference Issue, Penton/IPC, Cleveland, Vol. 53, No. 6 (March 19, 1981).

# Materiales disponibles: aleaciones de titanio

## **Appendix C-16** *Mechanical Properties of Some Wrought-Titanium Alloys*

		Tensile Strength				Elongation in 2 in. (%)	Charpy Impact Strength	
		Ultimate, $S_u$		Yield, $S_y$			ft · lb	J
Alloy	Designation	ksi	MPa	ksi	MPa			
Commercially pure alpha Ti	Ti-35A	35	241	25	172	24	11–40	15–54
Commercially pure alpha Ti	Ti-50A	50	345	40	276	20	11–40	15–54
Commercially pure alpha Ti	Ti-65A	65	448	55	379	18	11–40	15–54
Alpha alloy	Ti-0.2Pd	50	345	40	276	20	—	—
Alpha–beta alloy	Ti-6Al-4V	130–160 <sup>a</sup>	896–1103 <sup>a</sup>	120–150 <sup>a</sup>	827–1034 <sup>a</sup>	10-7	10–20	14–27
Beta alloy	Ti-3Al-13V-11Cr	135–188 <sup>a</sup>	931–1296 <sup>a</sup>	130–175 <sup>a</sup>	896–1207 <sup>a</sup>	16-6	5–15	7–20

<sup>a</sup>Depending on heat treatment.

*Note:* Values tabulated are approximate median expectations.

*Source:* *Machine Design*, 1981 Materials Reference Issue, Penton/IPC, Cleveland, Vol. 53, No. 6 (March 19, 1981).

# Materiales disponibles: polímeros

## Appendix C-18a *Representative Mechanical Properties of Some Common Plastics*

Plastic	Tensile Strength, $S_u$		Elongation in 2 in. (%)	Izod Impact Strength		Friction Coefficient	
	ksi	MPa		ft · lb	J	With Self	With Steel
ABS (general purpose)	6	41	5–20	6.5	8.8		
Acrylic (standard molding)	10.5	72	6	0.4	0.5		
Cellulosic (cellulose acetate)	2–7	14–48		1–7	1.4–9.5		
Epoxy (glass-filled)	10–20	69–138	4	2–30	2.7–41		
Fluorocarbon (PTFE)	3.4	23	300	3	4.1		0.05
Nylon (6/6)	12	83	60	1	1.4	0.04–0.13	
Phenolic (wood–flour-filled)	7	48	0.4–0.8	0.3	0.4		
Polycarbonate (general purpose)	9–10.5	62–72	110–125	12–16	16–22	0.52	0.39
Polyester (20 to 30 percent glass-filled)	16–23	110–90	1–3	1.0–1.9	1.4–2.6	0.12–0.22	0.12–0.13
Polypropylene (unmodified resin)	5	34	10–20	0.5–2.2	0.7–3.0		

*Note:* Values shown are typical; both higher and lower values may be commercially obtainable. Also see Appendix C-18b.

*Sources:* *Machine Design*, 1981 Materials Reference Issue, Penton/IPC, Cleveland, Vol. 53, No. 6 (March 19, 1981); *Materials Engineering*, 1981 Materials Selector Issue, Penton/IPC, Cleveland, Vol. 92, No. 6 (Dec. 1980).

# Materials disponibles: cerámicos

**TABLE 14-3** ■ *Mechanical properties of selected advanced ceramics*

Material	Density (g/cm <sup>3</sup> )	Tensile Strength (psi)	Flexural Strength (psi)	Compressive Strength (psi)	Young's Modulus (psi)	Fracture Toughness (psi √in.)
Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	3.98	30,000	80,000	400,000	56 × 10 <sup>6</sup>	5,000
SiC (sintered)	3.1	25,000	80,000	560,000	60 × 10 <sup>6</sup>	4,000
Si <sub>3</sub> N <sub>4</sub> (reaction bonded)	2.5	20,000	35,000	150,000	30 × 10 <sup>6</sup>	3,000
Si <sub>3</sub> N <sub>4</sub> (hot pressed)	3.2	80,000	130,000	500,000	45 × 10 <sup>6</sup>	5,000
Sialon	3.24	60,000	140,000	500,000	45 × 10 <sup>6</sup>	9,000
ZrO <sub>2</sub> (partially stabilized)	5.8	65,000	100,000	270,000	30 × 10 <sup>6</sup>	10,000
ZrO <sub>2</sub> (transformation toughened)	5.8	50,000	115,000	250,000	29 × 10 <sup>6</sup>	11,000

# Materials disponibles: composites

**TABLE 16-2** ■ *Properties of selected reinforcing materials\**

Material	Density (g/cm <sup>3</sup> )	Tensile Strength (ksi)	Modulus of Elasticity (×10 <sup>6</sup> psi)	Melting Temperature (°C)	Specific Modulus (×10 <sup>7</sup> in.)	Specific Strength (×10 <sup>6</sup> in.)
<b>Polymers:</b>						
Kevlar™	1.44	650	18.0	500	34.7	12.5
Nylon	1.14	120	0.4	249	1.0	2.9
Polyethylene	0.97	480	25.0	147	7.1	13.7
<b>Metals:</b>						
Be	1.83	185	44.0	1277	77.5	2.8
Boron	2.36	500	55.0	2030	64.7	4.7
W	19.40	580	59.0	3410	8.5	0.8
<b>Glass:</b>						
E-glass	2.55	500	10.5	<1725	11.4	5.6
S-glass	2.50	650	12.6	<1725	14.0	7.2
<b>Carbon:</b>						
HS (high strength)	1.75	820	40.0	3700	63.5	13.0
HM (high modulus)	1.90	270	77.0	3700	112.0	3.9
<b>Ceramics:</b>						
Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	3.95	300	55.0	2015	38.8	2.1
B <sub>4</sub> C	2.36	330	70.0	2450	82.4	3.9
SiC	3.00	570	70.0	2700	47.3	5.3
ZrO <sub>2</sub>	4.84	300	50.0	2677	28.6	1.7
<b>Whiskers:</b>						
Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	3.96	3000	62.0	1982	43.4	21.0
Cr	7.20	1290	35.0	1890	13.4	4.9
Graphite	1.66	3000	102.0	3700	170.0	50.2
SiC	3.18	3000	70.0	2700	60.8	26.2
Si <sub>3</sub> N <sub>4</sub>	3.18	2000	55.0		47.8	17.5

## Appendix C-24 Relations Between Failure Modes and Material Properties

Failure mode	Material property													
	Ultimate tensile strength	Yield strength	Compressive yield strength	Shear yield strength	Fatigue properties	Ductility	Impact energy	Transition temperature	Modulus of elasticity	Creep rate	$K_{Ic}$	Electrochemical potential	Hardness	Coefficient of expansion
Gross yielding														
Buckling														
Creep														
Brittle fracture														
Fatigue, low cycle														
Fatigue, high cycle														
Contact fatigue														
Fretting														
Corrosion														
Stress-corrosion cracking														
Galvanic corrosion														
Hydrogen embrittlement														
Wear														
Thermal fatigue														
Corrosion fatigue														

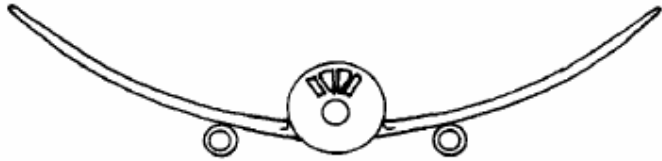
Shaded block at intersection of material property and failure mode indicates that a particular material property is influential in controlling a particular failure mode.



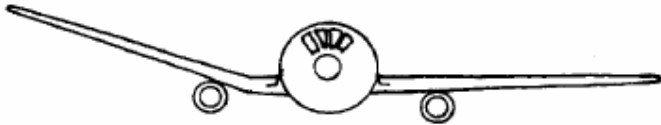
# Ejem: diseño de las alas de un avión



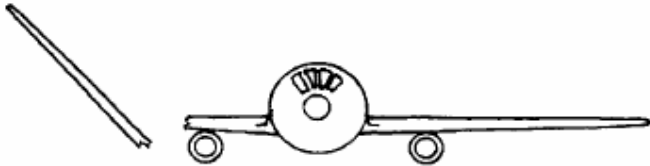
OK



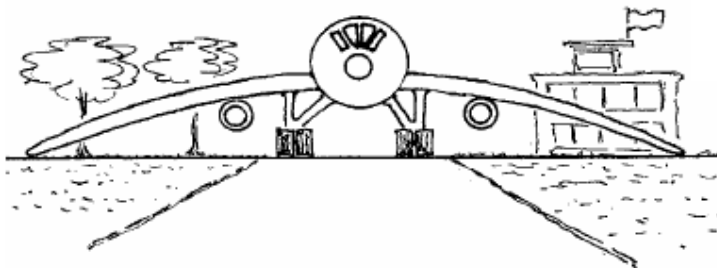
Rigidez no es suficiente



Resistencia no es suficiente



Ductilidad no es suficiente



Demasiado peso

- Propiedades que debe tener el material con el que se construyen
  - Rigidez
  - Resistencia
  - Ductilidad
  - Ligereza

# Para empezar...

1. Identificar los atributos (propiedades) que se necesita que el material elegido tenga.
2. Comparar estos atributos (propiedades) con los de los materiales que se conocen.

# Estrategia de selección

## Traslación:

- Función
- Objetivo
- Restricciones
- Variables libres



## Cribado

Se eliminan los materiales que no pueden hacer la función



## Optimización

Identificar los **índices del material**  
→ propiedades que optimizan el comportamiento del material

Resultado:  
Lista corta de materiales

# Traslación

- Trasladar los requerimientos de diseño a la selección del material

FUNCIÓN	¿Qué hace el componente/producto?
OBJETIVO	¿Qué hay que maximizar/minimizar?
RESTRICCIONES	Condiciones no negociables Condiciones negociables, pero deseables

# Traslación: índices del material

- Exploración de la combinación de propiedades que caracteriza el rendimiento/eficiencia de un material para una aplicación dada

Diseño de elementos estructurales dado por:

- Requerimientos funcionales (F)
- Parámetros geométricos (G)
- Propiedades del material (M)

→

$$p = f[F, G, M]$$

Rendimiento del elemento estructural

Si F, G, M son independientes:

$$p = f_1(F) \bullet f_2(G) \bullet f_3(M)$$

→ La selección óptima del material es independiente de la geometría y los requerimientos funcionales → se puede realizar la selección del material sin tener en cuenta G, F

# Traslación: índices del material

$$p = f_1(F) \bullet f_2(G) \bullet f_3(M)$$

Índice estructural

Índice del material

- *El diseño óptimo implica la selección del material con  $p$  máximo*
- $P$  se maximiza si se maximiza  $f_3(M)$  para  $f_1(F)$  y  $f_2(G)$  dados

*Cada combinación de función, objetivo y restricciones da lugar a un índice de material, que es característico de esa combinación*

# Resumen: etapas del proceso de selección

1. Identificar:
  - *función*,
  - *objetivo*
  - *restricciones*,
  - variables libres.
2. Identificar los *índices del material*, o índices de rendimiento:
  2. Escribir la *función objetivo*.
  3. Eliminar variables libres utilizando las restricciones
  4. Agrupar las propiedades del material que maximizan la función objetivo
3. Considerar límites de propiedades.
4. Crear *gráficos de selección* y utilizarlos para reducir el número de candidatos.

# Cribado

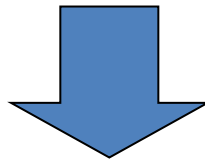
- **Límite de propiedades** → Elimina candidatos que no cumplen los requerimientos
- **Índices del material** (índices de rendimiento o de eficiencia) → Combinación de propiedades → Seleccionar los candidatos que cumplen bien los requerimientos

FUNCIÓN	¿Qué hace el componente/producto?
OBJETIVO	¿Qué hay que maximizar/minimizar?
RESTRICCIONES	Condiciones no negociables Condiciones negociables, pero deseables



# Cribado

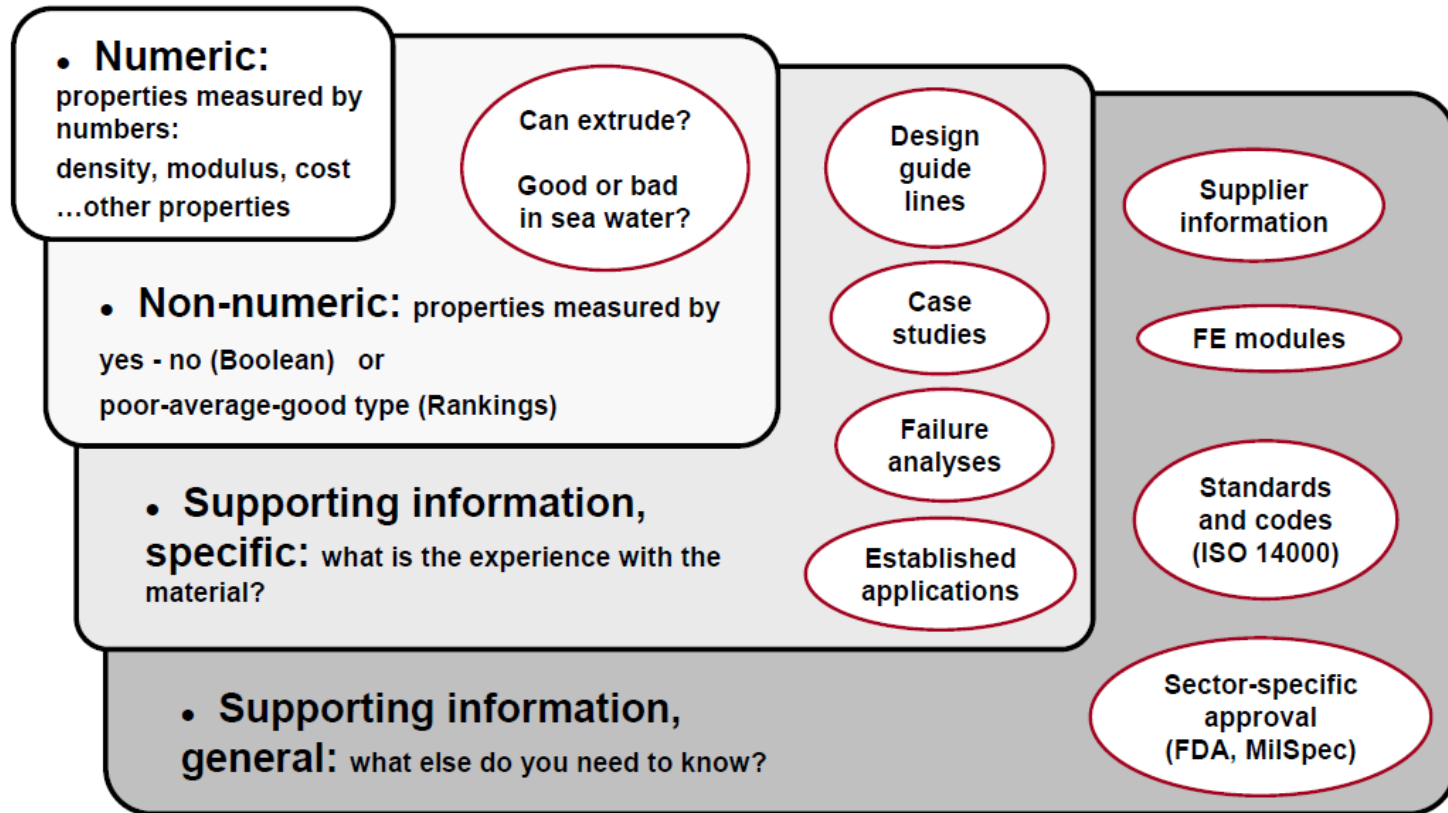
FUNCIÓN	¿Qué hace el componente/producto? Soportar carga, contener presión, transmitir calor...
OBJETIVO	¿Qué hay que maximizar/minimizar? Tiene que ser barato (precio), ligero (densidad), seguro...
RESTRICCIONES	Condiciones no negociables: Dimensiones fijas, carga que debe soportar, temperatura de trabajo... Condiciones negociables, pero deseables: estética, coste



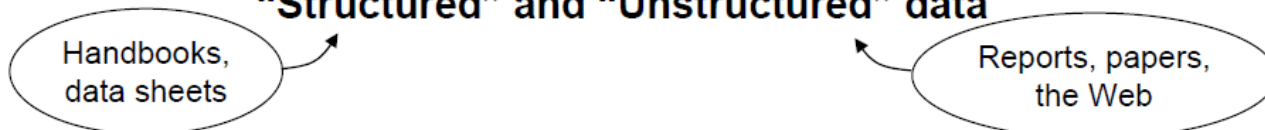
Definen las condiciones de contorno  
para la selección de un material

# Cribado

- Propiedades del material limitan su función → propiedades limitantes
- Necesitamos datos sobre los materiales disponibles → ¿de qué tipo?

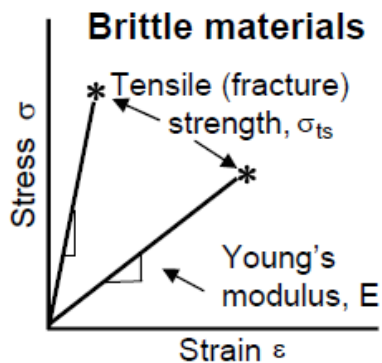
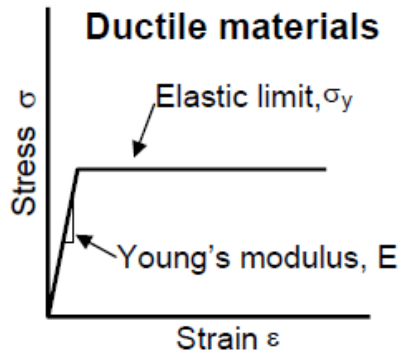
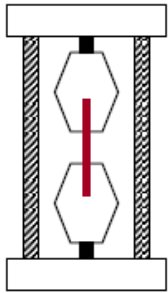


## “Structured” and “Unstructured” data



# Cribado: propiedades básicas de los materiales

## Mechanical properties



### General

Weight: Density  $\rho$ , Mg/m<sup>3</sup>

Expense: Cost/kg  $C_m$ , \$/kg

### Mechanical

Stiffness: Young's modulus  $E$ , GPa

Strength: Elastic limit  $\sigma_y$ , MPa

Fracture strength: Tensile strength  $\sigma_{ts}$ , MPa

Brittleness: Fracture toughness  $K_{ic}$ , MPa.m<sup>1/2</sup>

### Thermal

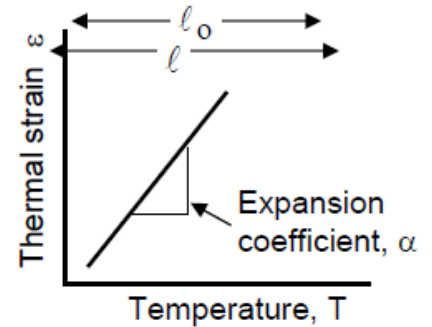
Expansion: Expansion coeff.  $\alpha$ , 1/K

Conduction: Thermal conductivity  $\lambda$ , W/m.K

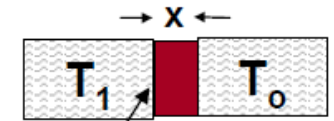
### Electrical

Conductor? Insulator?

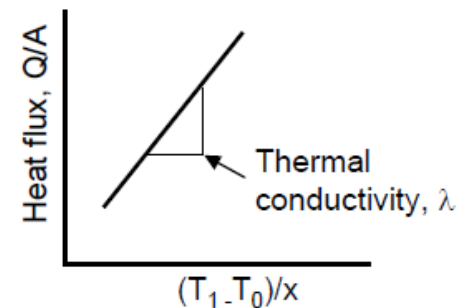
## Thermal expansion



## Thermal conduction



Area  $A$   $\dots \rightarrow Q$  joules/sec



# Cribado: información sobre materiales

- Información que podemos encontrar en una base de datos sobre un material en particular → no permite la comparación

## Acrylonitrile butadiene styrene (ABS)

### *The Material*

ABS (Acrylonitrile-butadiene-styrene) is tough, resilient, and easily molded. It is usually opaque, although some grades can now be transparent, and it can be given vivid colors. ABS-PVC alloys are tougher than standard ABS and, in self-extinguishing grades, are used for the casings of power tools.

### *General properties*

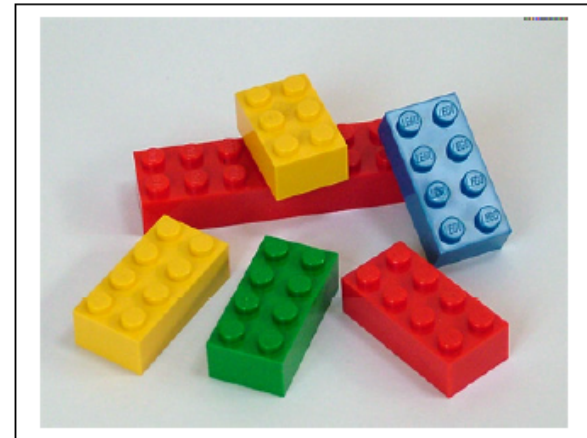
Density	1e3	-	1.2e3	kg/m <sup>3</sup>
Price	2	-	2.7	USD/kg

### *Mechanical properties*

Young's modulus	1.1	-	2.9	GPa
Hardness - Vickers	5.6	-	15	HV
Elastic limit	19	-	51	MPa
Tensile strength	28	-	55	MPa
Compressive strength	31	-	86	MPa
Elongation	1.5	-	1e2	%
Endurance limit	11	-	22	MPa
Fracture toughness	1.2	-	4.3	MPa.m <sup>1/2</sup>

### *Typical uses*

Safety helmets; camper tops; automotive instrument panels and other interior components; pipe fittings; home-security devices and housings for small appliances; communications equipment; business machines; plumbing hardware; automobile grilles; wheel covers; mirror housings; refrigerator liners; luggage shells; tote trays; mower shrouds; boat hulls; large components for recreational vehicles; weather seals; glass beading; refrigerator breaker strips; conduit; pipe for drain-waste-vent (DWV) systems.



### *Thermal properties*

Thermal conductivity	0.19	-	0.34	W/m.K
Thermal expansion	85	-	230	µstrain/°C
Specific heat	1400	-	1900	J/kg.K
Glass Temperature	88	-	130	°C
Max service temp.	62	-	90	°C

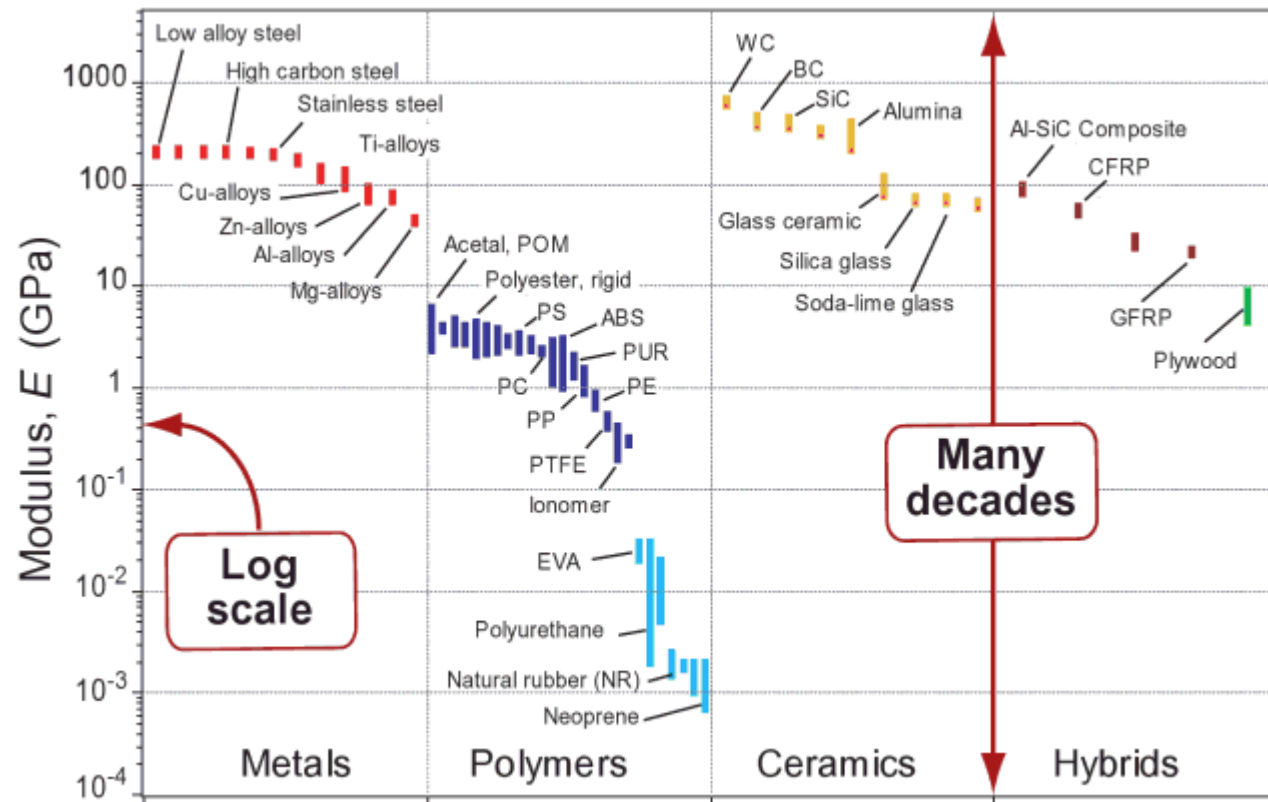
### *Electrical properties*

Resistivity	2.3e21	-	3e22	µohm.cm
Dielectric constant	2.8	-	2.2	

Figure 8. Part of a record for a material, ABS. It contains numeric data, text and image-based information.

# Cribado: gráficos de propiedades

- Y necesitamos poder comparar esa información para comparar materiales → gráficos de selección
- **Mapas de barras**
  - Cada barra representa un material.
  - Su longitud muestra el rango de valores que puede presentar la propiedad.
  - Se señala la familia de materiales dejando en evidencia si la característica presenta una tendencia concreta para cada familia.

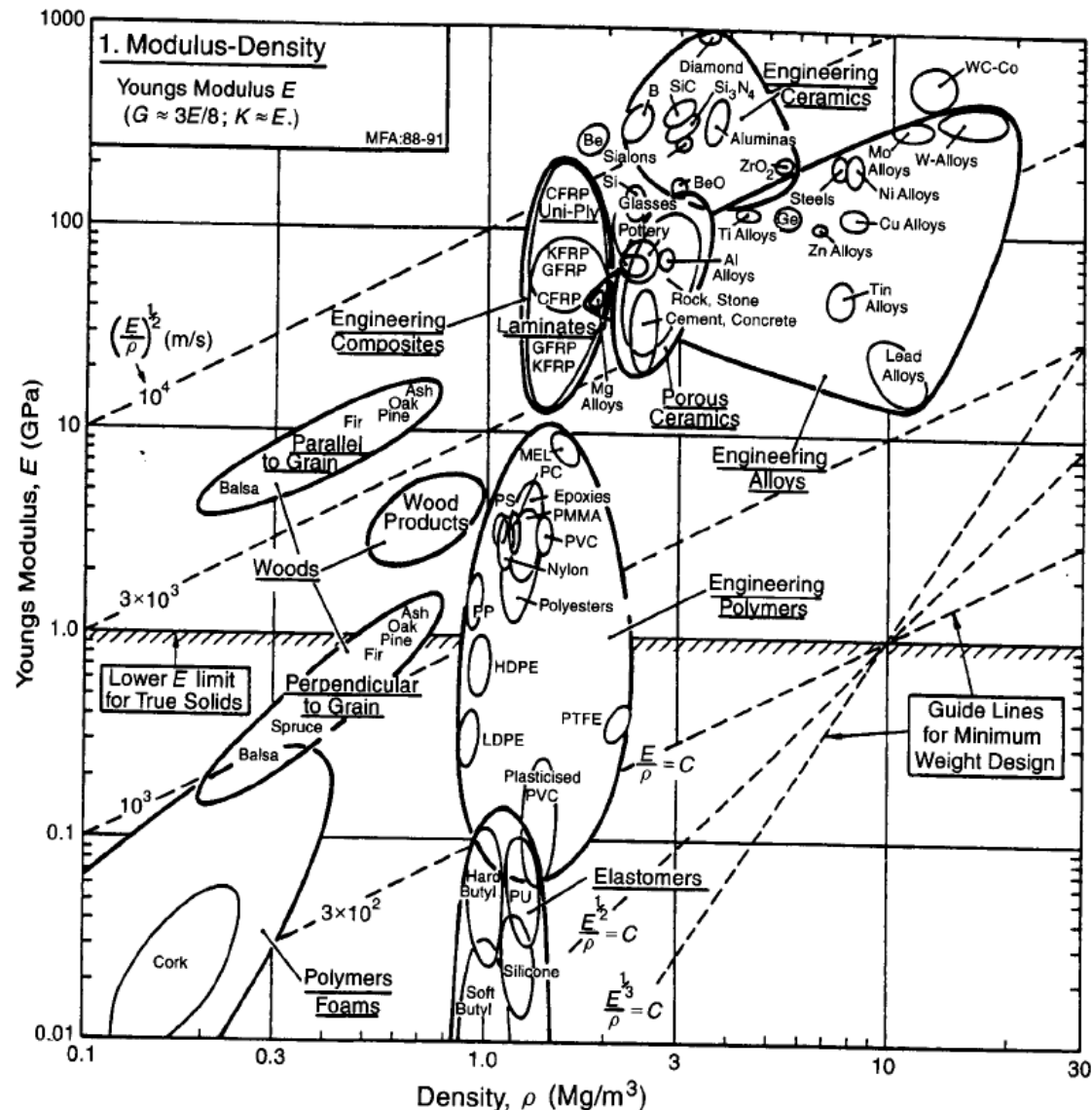


# Cribado: gráficos de propiedades

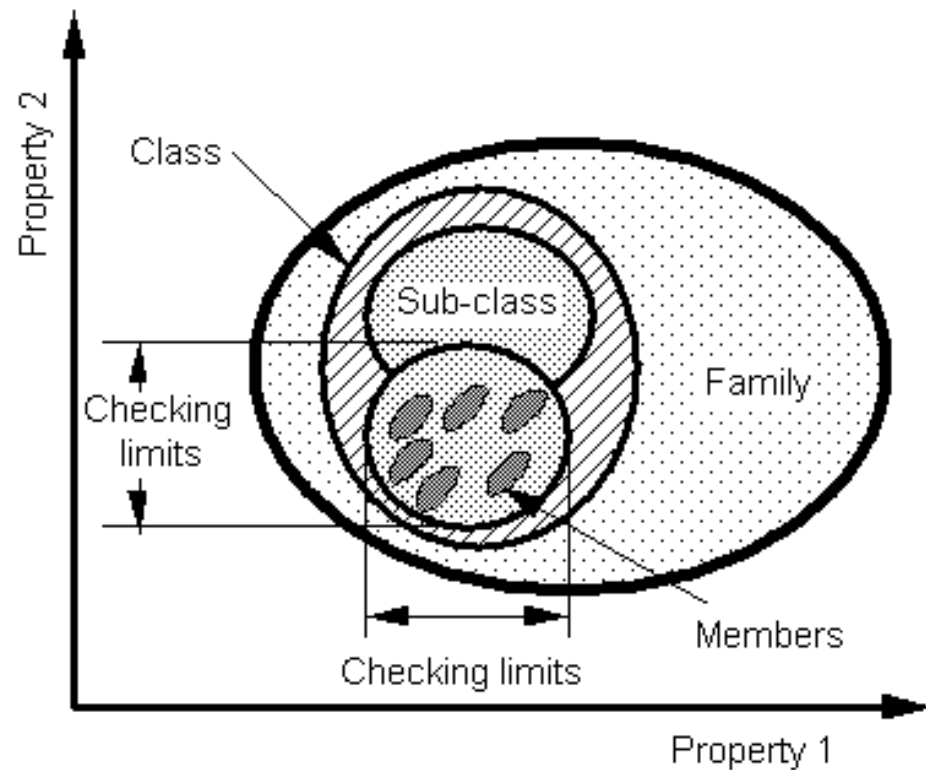
- **Gráficos de selección**
- Además la elección de un material va a depender de más de una propiedad:

Ejem: Rigidez vs. Densidad en un diseño estructural ligero

- Se representa una propiedad frente a otra.
- Escalas logarítmicas
- Datos de una familia están contenidos en subrangos determinados.
- Los índices del material están representados.

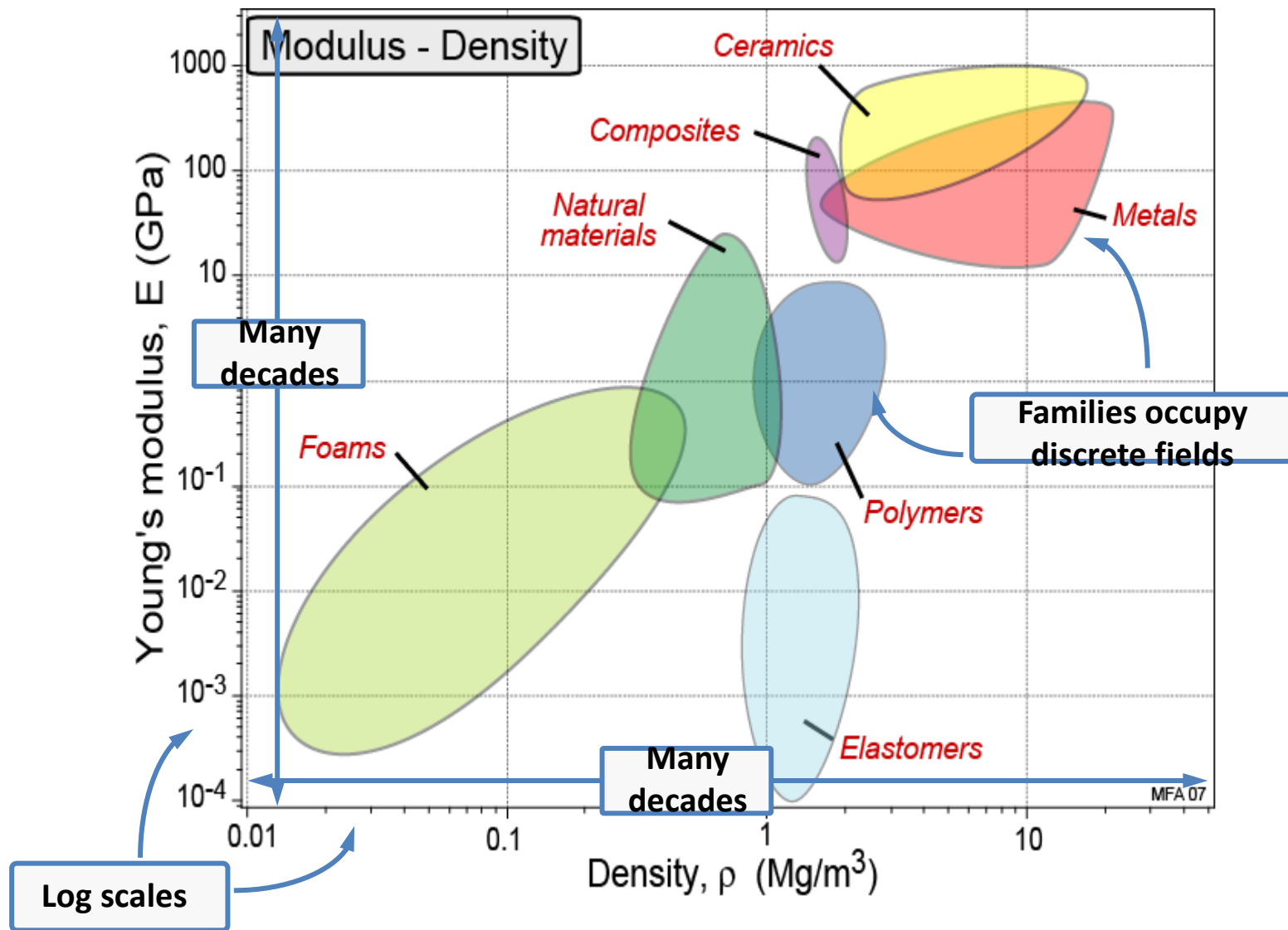


# Gráficos de selección



**Figure 1.9 Schematic relationship between database hierarchy and property (attribute) ranges**

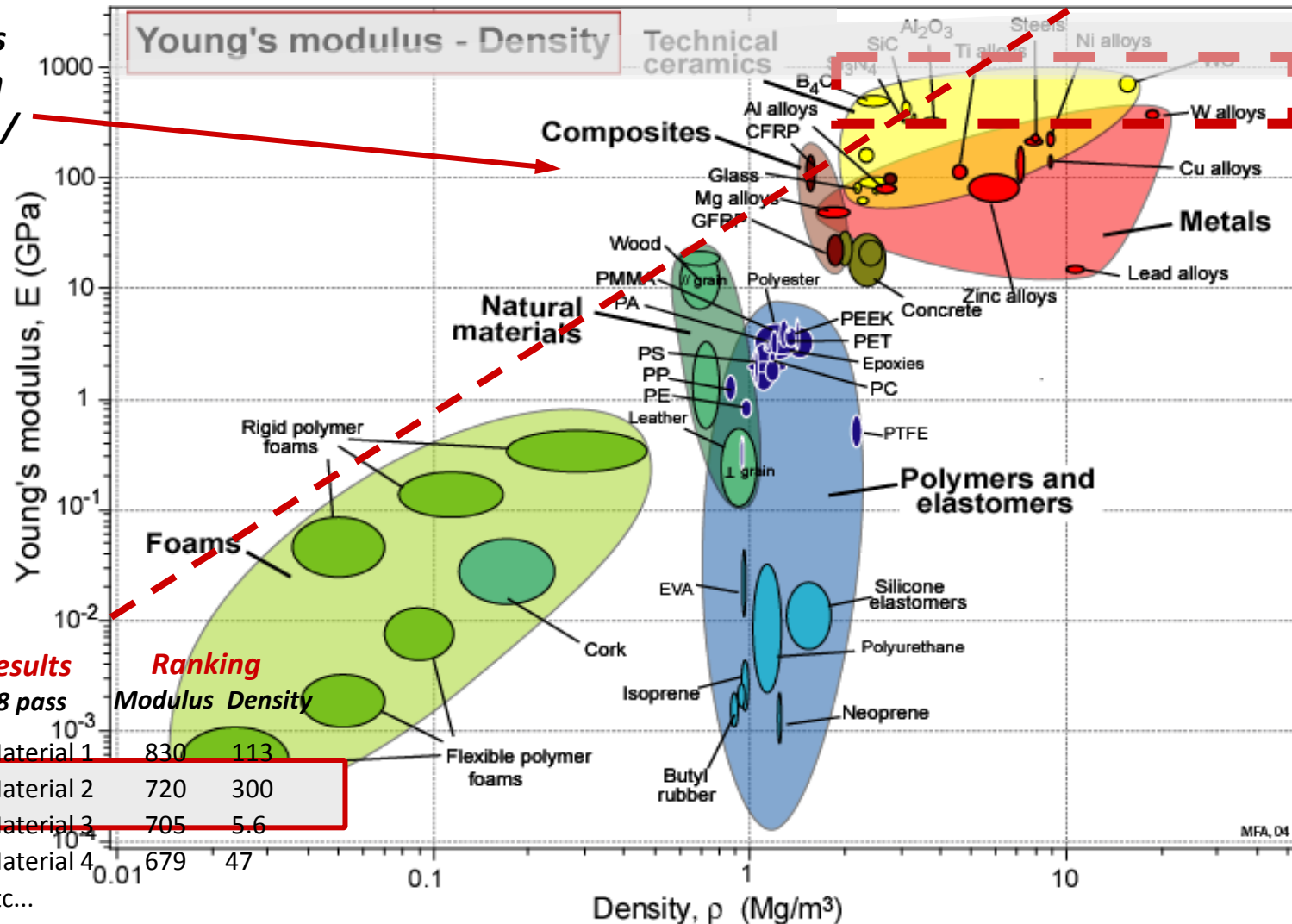
# Mapas de propiedades o de Ashby





# Mapas de propiedades o de Ashby

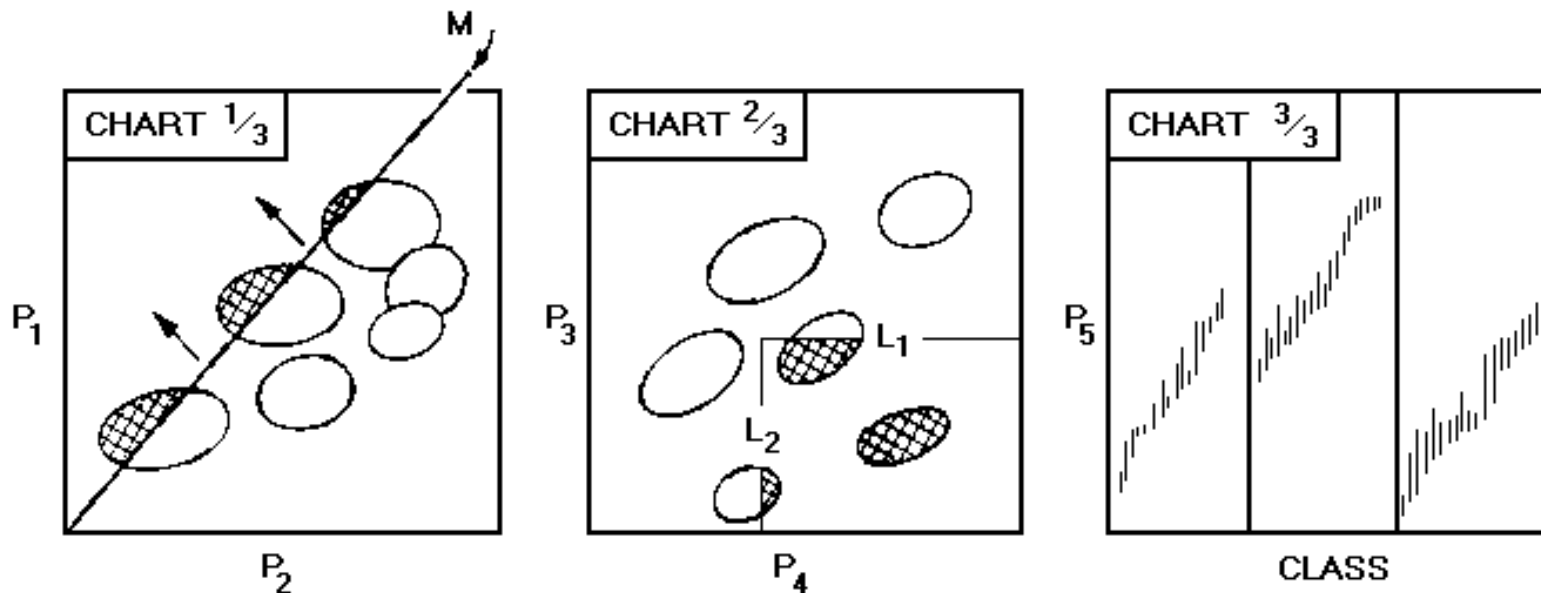
**Materials with high Modulus / Density**



# Uso de los gráficos de selección

- M función de dos propiedades  $P_1, P_2$ .
- Las demás propiedades,  $P_3, P_4, \dots$ , estarán limitadas.

$$M = \frac{P_1}{P_2^n} \quad \log P_1 = n \log P_2 + \log M$$



# Uso de los gráficos de selección

- Aplicación de límites

$$E \geq 10 \text{ GPa}$$
$$\rho \leq 3 \text{ g/cm}^3$$

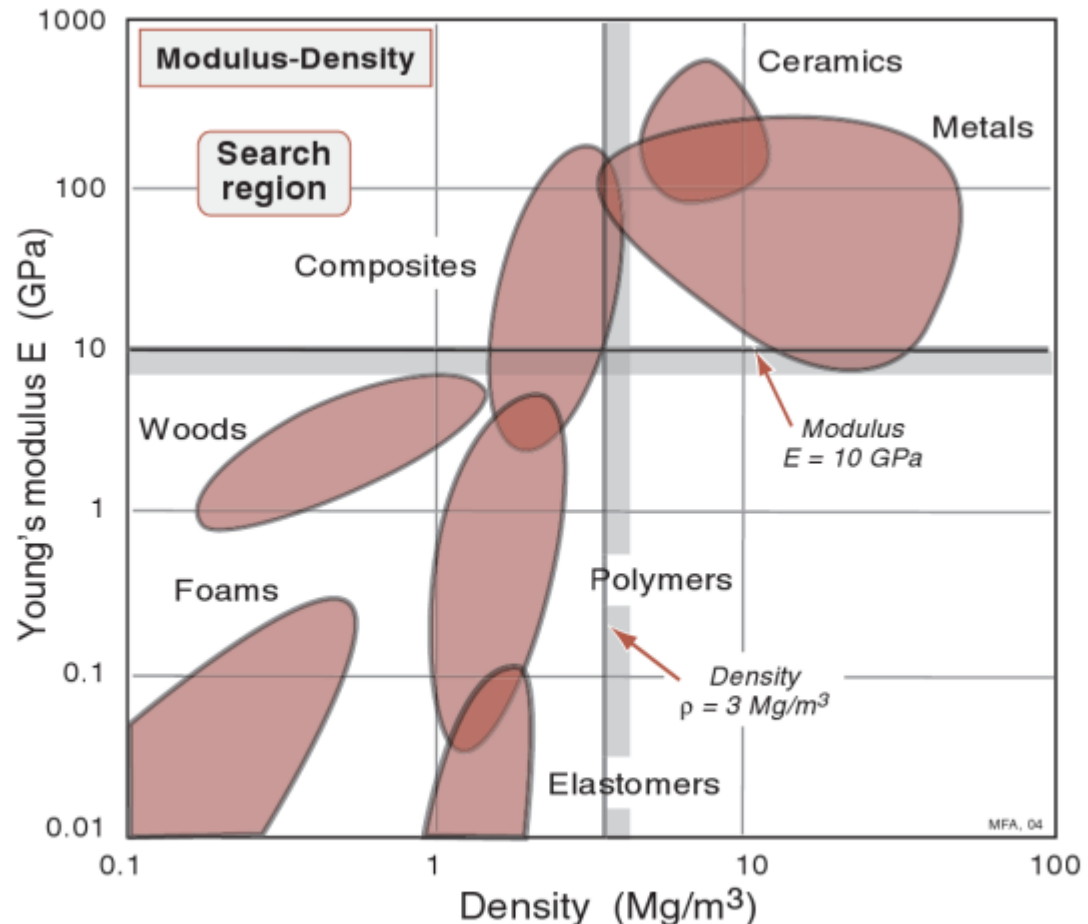


Figure 5.10 A schematic  $E - \rho$  chart showing a lower limit for  $E$  and an upper one for  $\rho$ .

# Uso de los gráficos de selección

- Aplicación de funciones índice

Para una viga ligera y resistente:

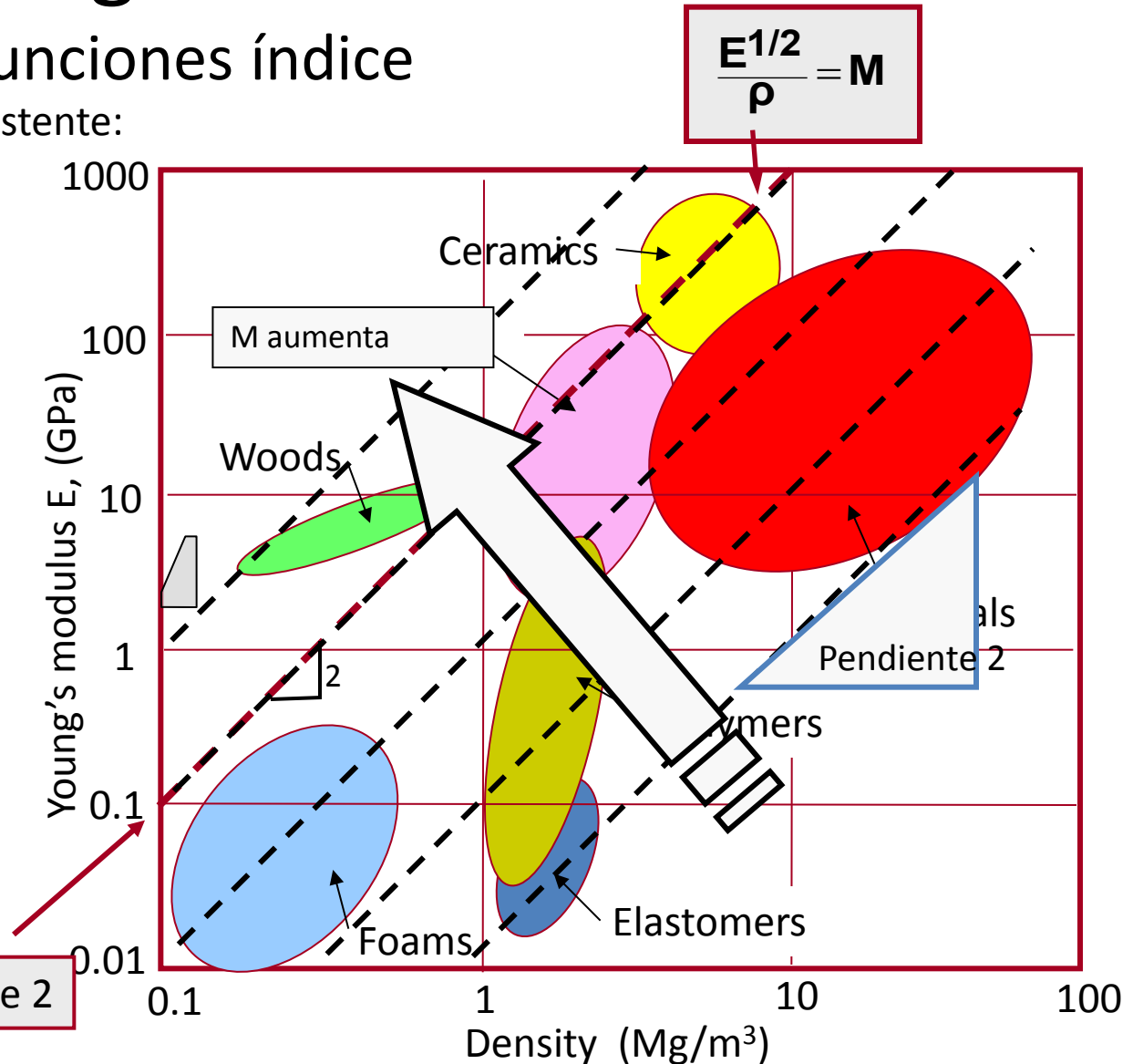
$$\text{Índice: } M = \frac{E^{1/2}}{\rho}$$

$$E = \rho^2 M^2$$

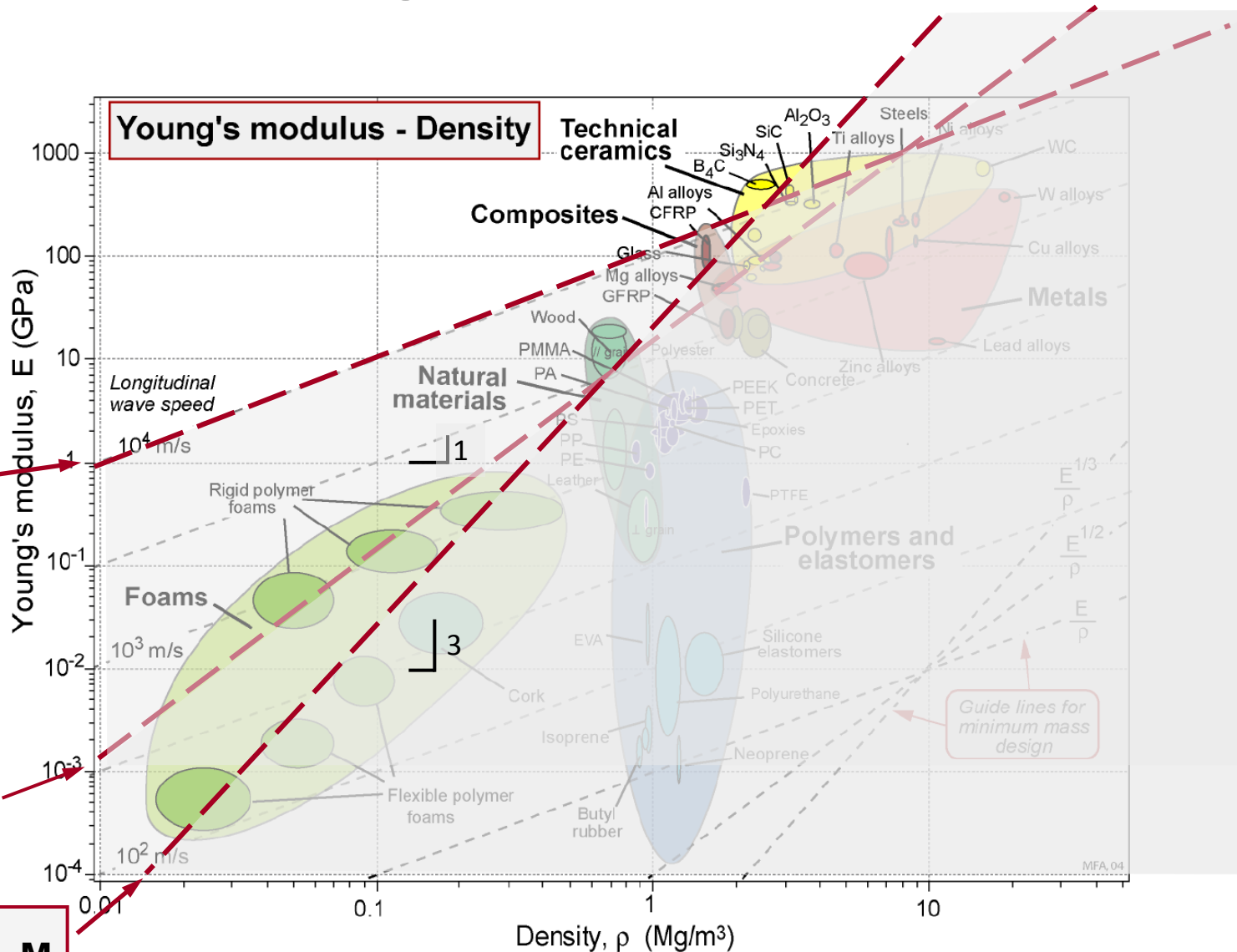
Tomando logaritmos:

$$\log E = 2 \log \rho + 2 \log M$$

Familias de líneas de pendiente 2

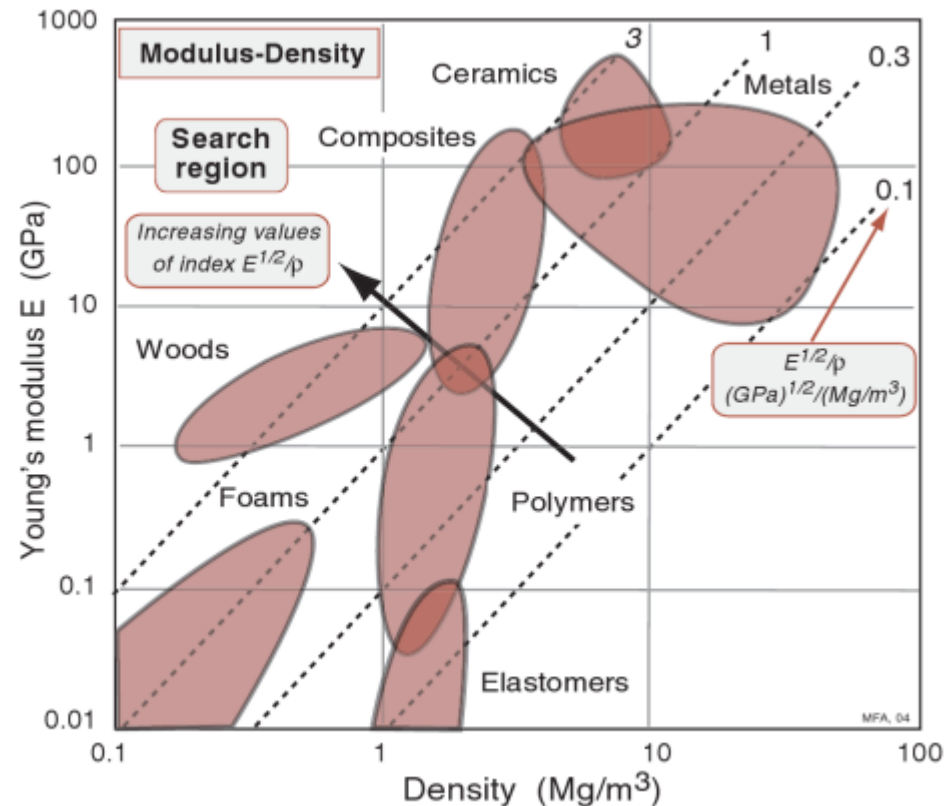


# Uso de los gráficos de selección



# Uso de los gráficos de selección

- **Líneas guía** → Familia de líneas paralelas correspondientes a un índice
- Los materiales por encima de la línea maximizan el índice y se comportarán mejor que los que están por debajo



# Uso de los gráficos de selección

Región óptima  
considerando ambos  
límites

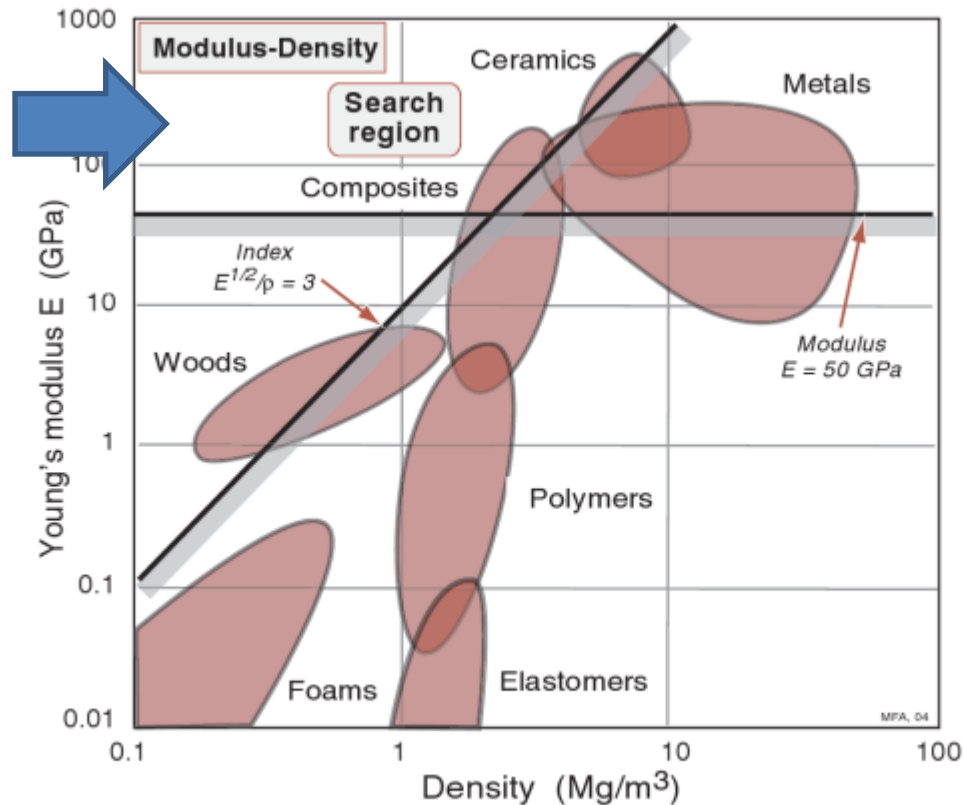
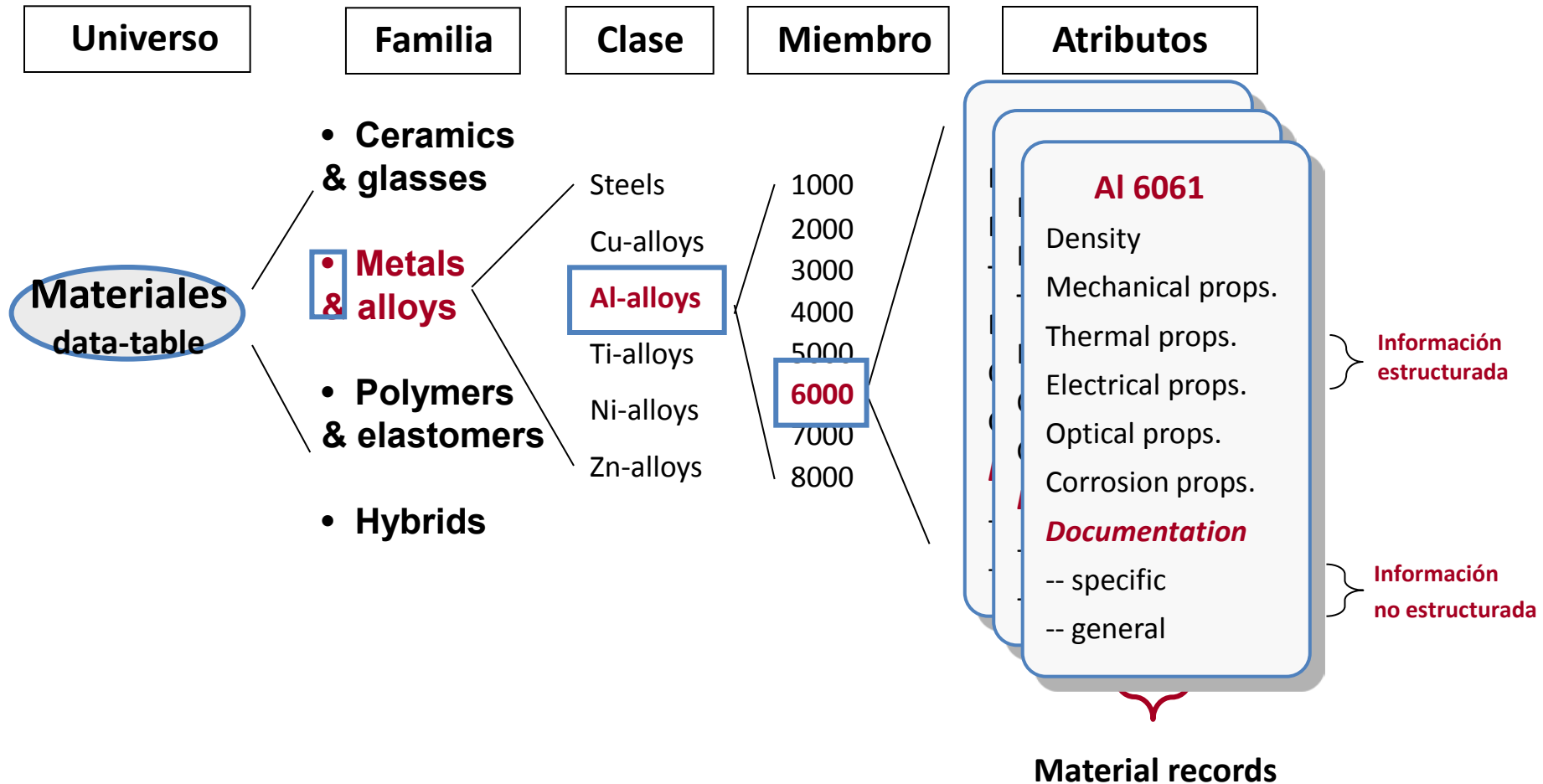


Figure 5.13 A selection based on the index  $M = E^{1/2}/\rho$  together with the property limit  $E > 50$  GPa.

# Organizando la información





# Ejem 1: Materiales para tuberías de intercambiadores de calor

- Se debe seleccionar un material que permita el intercambio máximo de calor entre el fluido 2 y el 1 y que soporte la diferencia de presión entre el sistema de conducción primario y secundario.

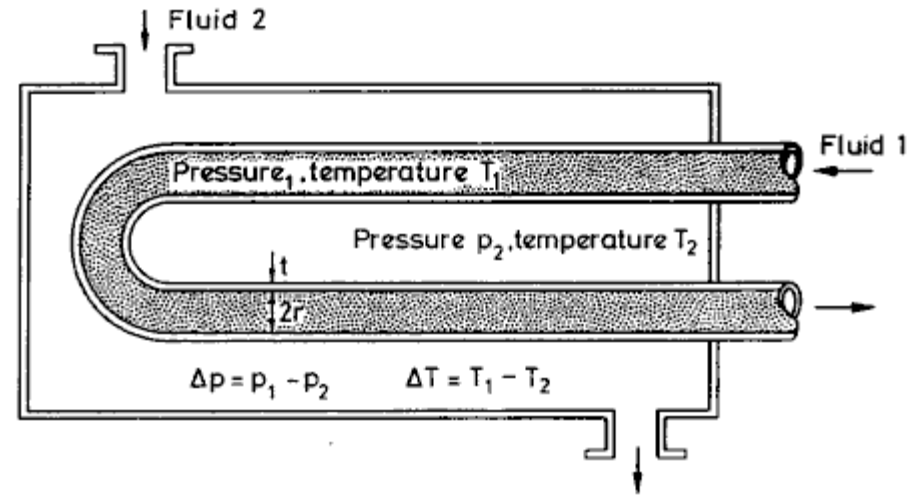


Figure 1 Schematic of a heat exchanger

- Establecer los requerimientos de diseño (función, objetivo, restricciones), identificar los índices del material, crear los gráficos de selección.

# Ejem 1: Materiales para tuberías de intercambiadores de calor

<b>Función</b>	Intercambiador de calor
<b>Objetivo</b>	Maximizar el flujo de calor por unidad de área
<b>Límites</b>	<ul style="list-style-type: none"><li>• Soportar <math>\Delta P</math>.</li><li>• Soportar <math>[Cl^-]</math>.</li><li>• Temperatura de trabajo <math>\sim 150\text{ }^{\circ}\text{C}</math></li><li>• Barato</li></ul>

**F. Objetivo**  $\rightarrow$   $Q = \lambda A \frac{\Delta T_{12}}{t}$  donde Q es flujo de calor a través de la pared de una tubería de área A con conductividad  $\lambda$  y espesor t que separa dos medios cuyo gradiente de temperatura es  $\Delta T_{12}$  (apéndice A.14)

**F. Límite**  $\rightarrow$   $\sigma = \frac{\Delta P_{12} r}{t}$  donde  $\sigma$  es la tensión en la pared de la tubería de radio r y espesor t que soporta un gradiente de presión  $\Delta P_{12}$  (apéndice A.11)

# Ejem 1: Materiales para tuberías de intercambiadores de calor

<b>Función</b>	Intercambiador de calor
<b>Objetivo</b>	Maximizar el flujo de calor por unidad de área
<b>Límites</b>	<ul style="list-style-type: none"><li>• Soportar <math>\Delta P</math>.</li><li>• Soportar <math>[Cl^-]</math>.</li><li>• Temperatura de trabajo <math>\sim 150\text{ }^{\circ}\text{C}</math></li><li>• Barato</li></ul>

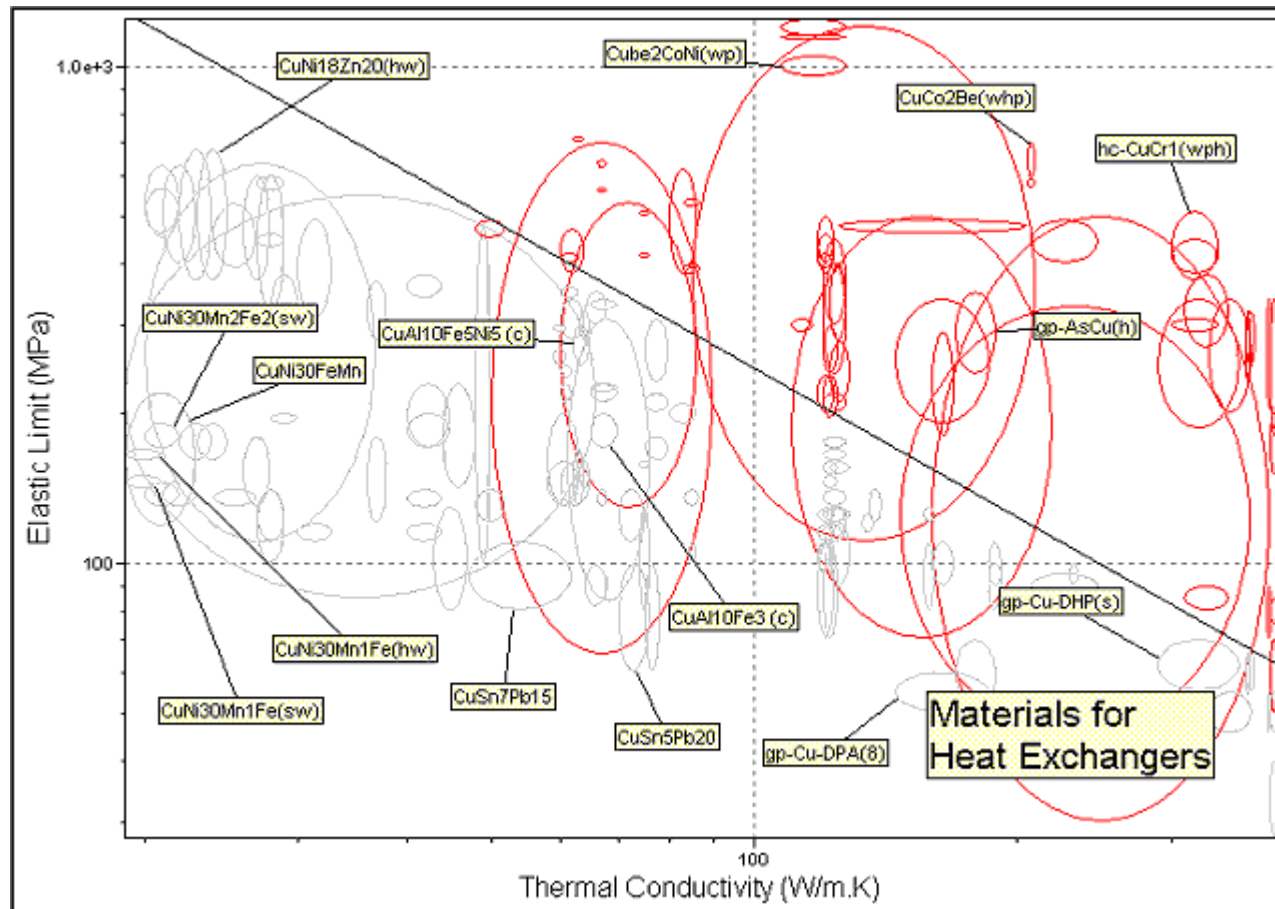
$$\sigma = \frac{\Delta P_{12} r}{t} < \sigma_{el}$$

← La tensión en la pared de la tubería debe ser menor que el límite elástico

Eliminando  $t$  de ambas ecuaciones  $\rightarrow Q = A \frac{\Delta T_{12}}{r \Delta P_{12}} (\lambda \sigma_{el})$

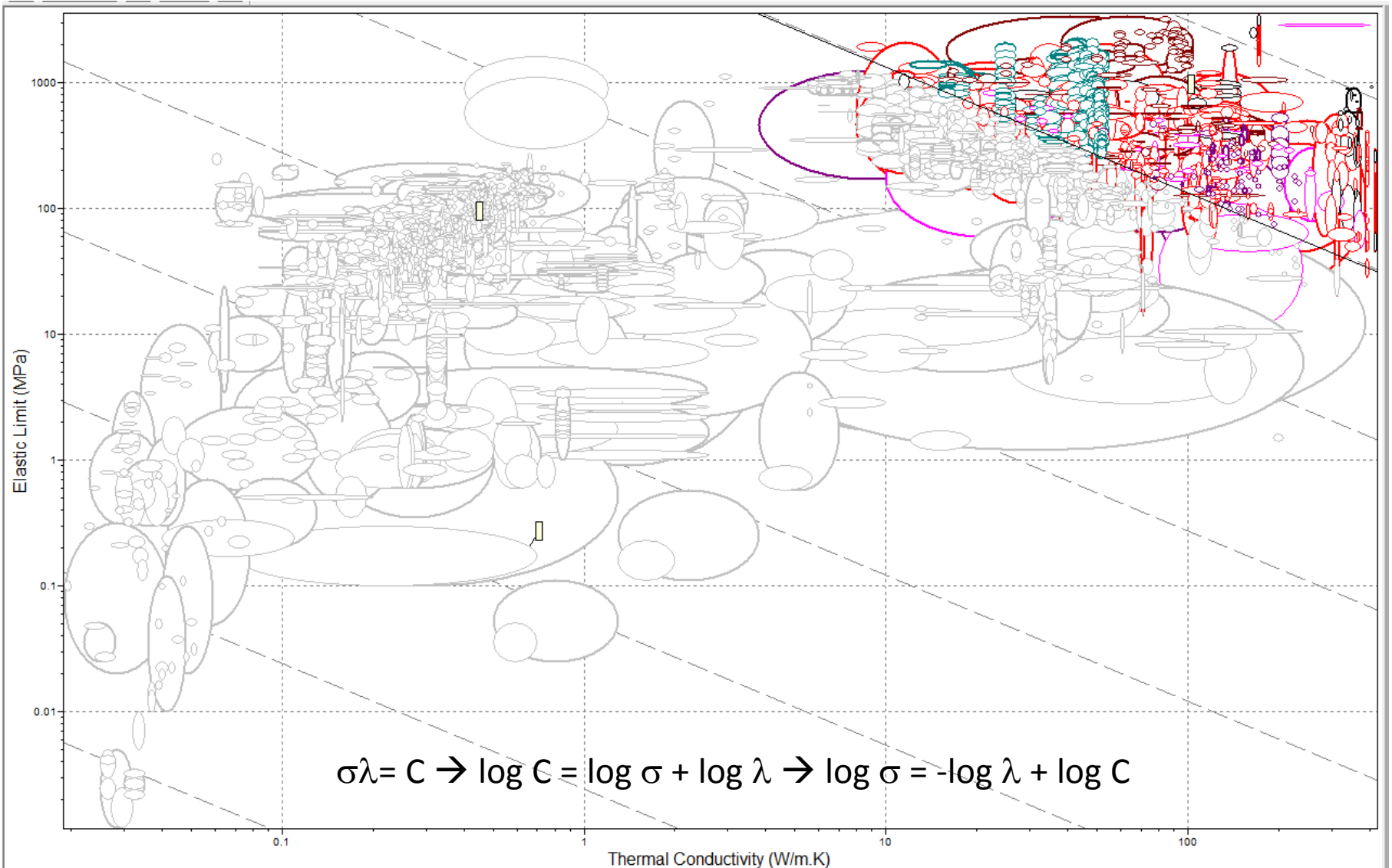
Índice

# Ejem 1: Materiales para tuberías de intercambiadores de calor

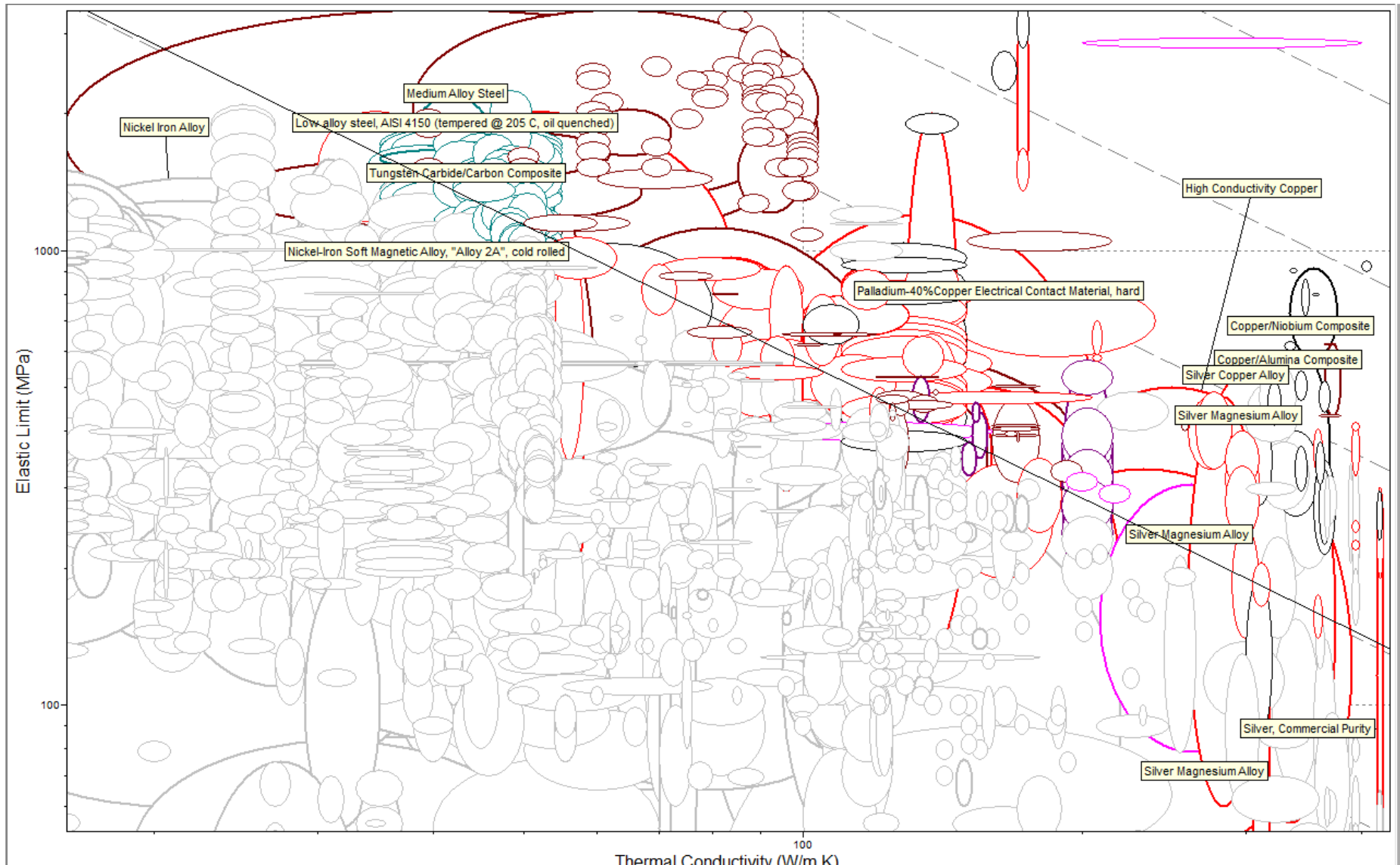


$$\sigma\lambda = C \rightarrow \log C = \log \sigma + \log \lambda \rightarrow \log \sigma = -\log \lambda + \log C$$

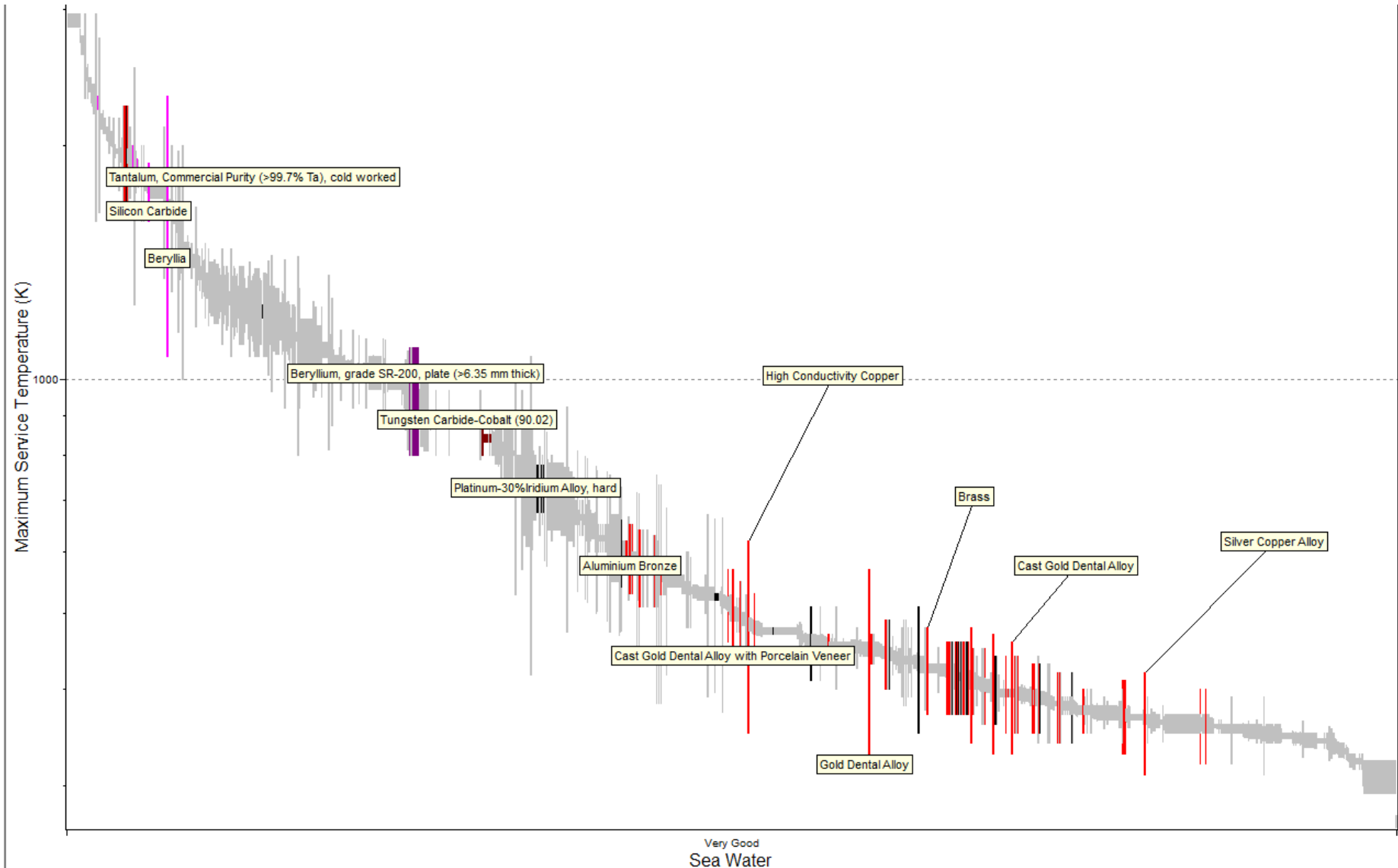
# Ejem 1: Materiales para tuberías de intercambiadores de calor



# Ejem 1: Materiales para tuberías de intercambiadores de calor



# Ejem 1: Materiales para tuberías de intercambiadores de calor



# Ejem 1: Materiales para tuberías de intercambiadores de calor

## Results

Material (ranked by $M_1$ )	Comment
High Conductivity Coppers	Have the best performance index, but relatively poor corrosion resistance
Brasses	Again, relatively poor corrosion resistance
Wrought Martensitic Stainless Steel	A good choice, but steel is more dense than copper
Aluminium Bronzes	An economical and practical choice

Name	Id	Name	Identity
Cast cobalt-base superalloy, "W1-52"	MM	93/7 Aluminium bronze, hard (wrou...	MMNFCUALW_...
Cast martensitic stainless steel (AST...	MM	93/7 Aluminium bronze, soft (wrought)	MMNFCUALW_...
Cast martensitic stainless steel (AST...	MM	95/5 Aluminium bronze, 1/2 hard (w...	MMNFCUALW_...
Cast martensitic stainless steel (AST...	MM	95/5 Aluminium bronze, hard (wrou...	MMNFCUALW_...
Cast martensitic stainless steel (AST...	MM	95/5 Copper-nickel, 1/2 hard (wrou...	MMNFCUNIW_...
Cast martensitic stainless steel (AST...	MM	Alumina	MCT_AO
Cast martensitic stainless steel (AST...	MM	Alumina (99.5)(finegrain)	MCT_AO0022
Cast martensitic stainless steel (AST...	MM	Alumina (pressed and sintered)	MCT_AO0031
Cast martensitic stainless steel (AST...	MM	Alumina Matrix Composite	MXC_AO
Cast martensitic stainless steel (AST...	MM	Aluminium Bronze	MMNFCUAL
Cast martensitic stainless steel (AST...	MM	Aluminium Nitride	MCT_AN
Cast martensitic stainless steel (AST...	MM	Aluminium Nitride	MCT_AN004
Cast martensitic stainless steel (AST...	MM	Aluminium Nitride (97)	MCT_AN003
Cast martensitic stainless steel (AST...	MM	Aluminium Nitride (AlN)	MCT_AN001
Chromium, Commercial Purity	MM	Aluminium bronze E, forged (wrought)	MMNFCUALW_...
Chromium, Commercial Purity, hard	MM	Aluminium bronze E, rolled (wrought)	MMNFCUALW_...
Chromium, Commercial Purity, soft	MM	Aluminium bronze, CuAl10Fe3 (cast)	MMNFCUALC_0...
Cobalt, Commercial Purity	MM	Aluminium bronze, CuAl10Fe5Ni5 (c...	MMNFCUALC_0...
Cobalt, Commercial Purity, hard (col...	MM	Beryllia	MCT_BO001
Cobalt, Commercial Purity, soft (ann...	MM	Beryllia	MCT_BO
Cobalt-base Superalloy	MM	Beryllia (99)	MCT_BO002
Coin Silver Electrical Contact Alloy, ...	MM	Beryllia (B995)	MCT_BO003
Coin Silver Electrical Contact Alloy, ...	MM	Beryllia (BZ)	MCT_BO004
Coinage bronze, hard (wrought)	MM	Beryllium	MMLABE
Copper Beryllium	MM	Beryllium, grade 0-50, hot isostatical...	MMLABEH002
Copper Nickel	MM	Beryllium, grade I-220B, vacuum ho...	MMLABEVH004
Copper-10% Niobium Composite (wire)	MX	Beryllium, grade I-250, hot isostatica...	MMLABEH003
Copper-12.5% Niobium Composite (...)	MX	Beryllium, grade I-400, vacuum hot...	MMLABEVH005
Copper-15% Niobium Composite (wire)	MX	Beryllium, grade I-70A, vacuum hot...	MMLABEVH003
Copper-18% Niobium Composite (wire)	MX	Beryllium, grade S-200, extruded	MMLABEW_E_...
Copper-2-Beryllium (cast)	MM	Beryllium, grade S-200F, vacuum h...	MMLABEVH002
Copper-24% Silver Composite (wire)	MX	Beryllium, grade S-200FC, cold isost...	MMLABEC001
Copper-7.5% Niobium Composite (wi...	MX	Beryllium, grade S-200FH, hot isost...	MMLABEH001
Copper-cobalt beryllium (cast)	MM	Beryllium, grade S-65B, vacuum hot...	MMLABEVH001
Copper-cobalt beryllium (w)	MM	Beryllium, grade SR-200, plate >6.3...	MMLABEW_R_...
Copper-cobalt beryllium (wh)	MM	Beryllium, grade SR-200, sheet (.5 t...	MMLABEW_R_...
Copper-cobalt beryllium (whp)	MM	Boron Carbide	MCT_BC
Copper-cobalt beryllium (wp)	MM	Boron Carbide (HIP)	MCT_BC001
Copper-manganese-aluminium, CuM...	MM	Brass	MMNFCUZN
Copper-manganese-aluminium, CuM...	MM	Brass: CuZn10Pb3Sn2 (sand-cast)	MMNFCUZN_...
Copper/Alumina Composite	MX	Brass: CuZn30Pb2 (sand-cast)	MMNFCUZN_...
Copper/Niobium Composite	MX	Brass: CuZn40 (gravity diecast)	MMNFCUZN_...
Diamond	MC	Brass: admiralty brass, 1/2 hard (wr...	MMNFCUZNW_...
Diamond/Carbide (laminated)	MY	Brass: admiralty brass, soft (wrought)	MMNFCUZNW_...



# Ejem 2: Materiales para juntas tóricas

Se debe seleccionar un material que permita sellar dos superficies planas y que sea reutilizable.

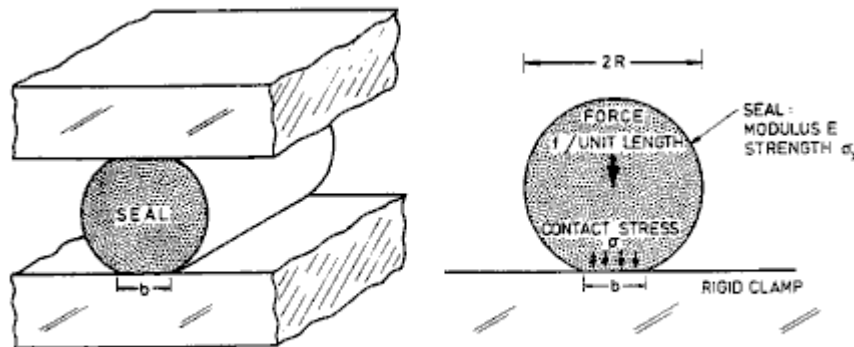


Figure 1 Schematic of an elastic seal

- Establecer los requerimientos de diseño (función, objetivo, restricciones), identificar los índices del material, crear los gráficos de selección.



# Ejem 2: Materiales para juntas tóricas

<b>Función</b>	Junta tórica
<b>Objetivo</b>	Maximizar el contacto entre la junta y la superficie
<b>Límites</b>	<ul style="list-style-type: none"><li>• Limitar la presión de contacto para que la superficie no se dañe.</li><li>• Reutilizable → elástico</li><li>• Barato</li></ul>

**F. Objetivo** →  $b \approx 2 \left( \frac{Fr}{E} \right)^{1/2}$  donde b es la superficie de contacto entre el cilindro de radio r y de módulo de Young E cuando se presiona contra una superficie plana con una fuerza F por unidad de longitud (apéndice A.8)

**F. Límite** →  $\sigma = 0.6 \left( \frac{FE}{r} \right)^{1/2}$  donde  $\sigma$  es la tensión en la superficie plana y en la junta

## Ejem 2: Materiales para juntas tóricas

<b>Función</b>	Junta tórica
<b>Objetivo</b>	Maximizar el contacto entre la junta y la superficie
<b>Límites</b>	<ul style="list-style-type: none"><li>• Limitar la presión de contacto para que la superficie no se dañe.</li><li>• Reutilizable.</li><li>• Barato</li></ul>

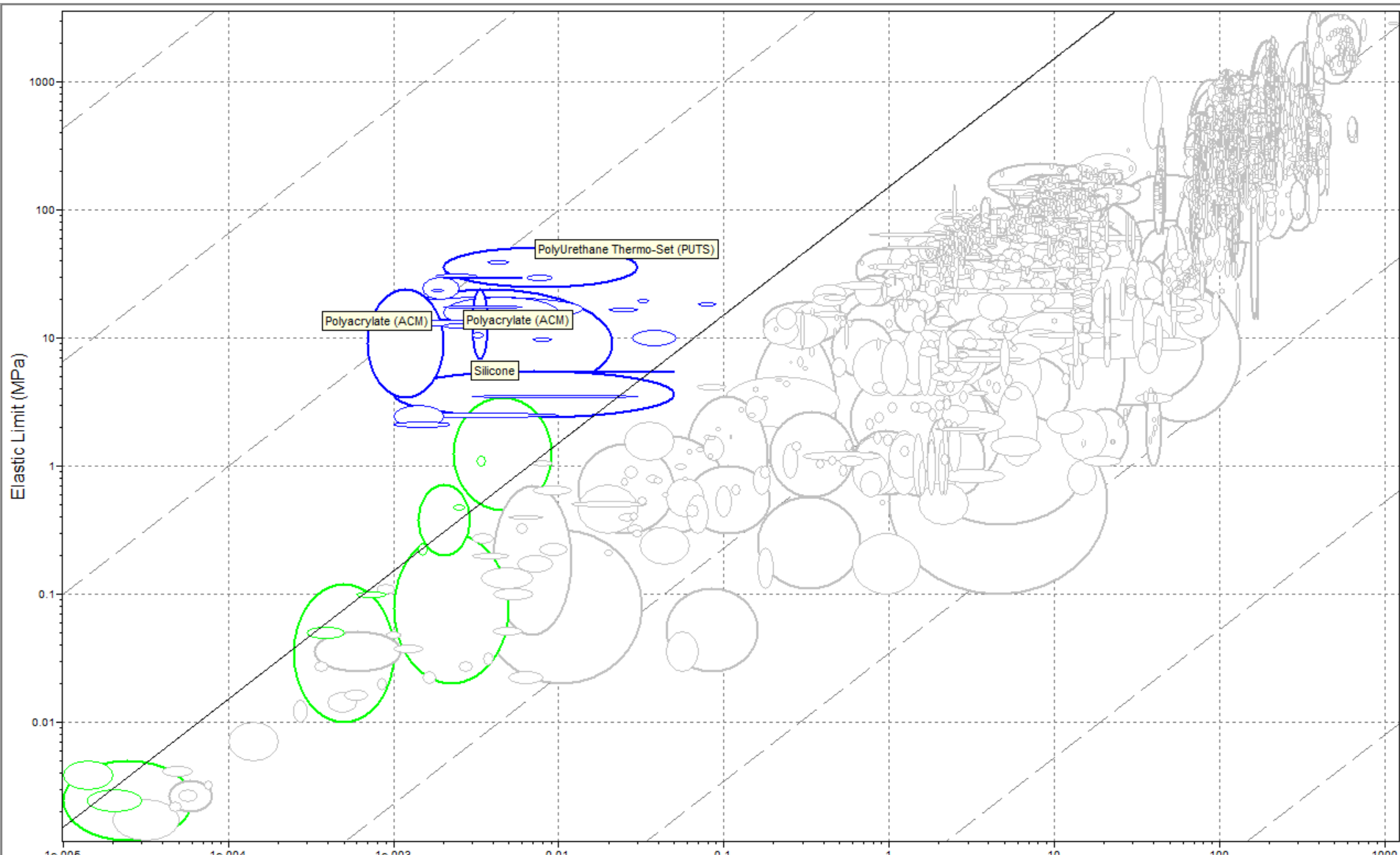
$$\sigma = 0.6 \left( \frac{FE}{r} \right)^{1/2} < \sigma_f \quad \leftarrow \begin{array}{l} \text{La tensión en la junta debe ser menor que el límite} \\ \text{de fractura del material} \end{array}$$

Eliminando f de ambas ecuaciones  $\rightarrow$

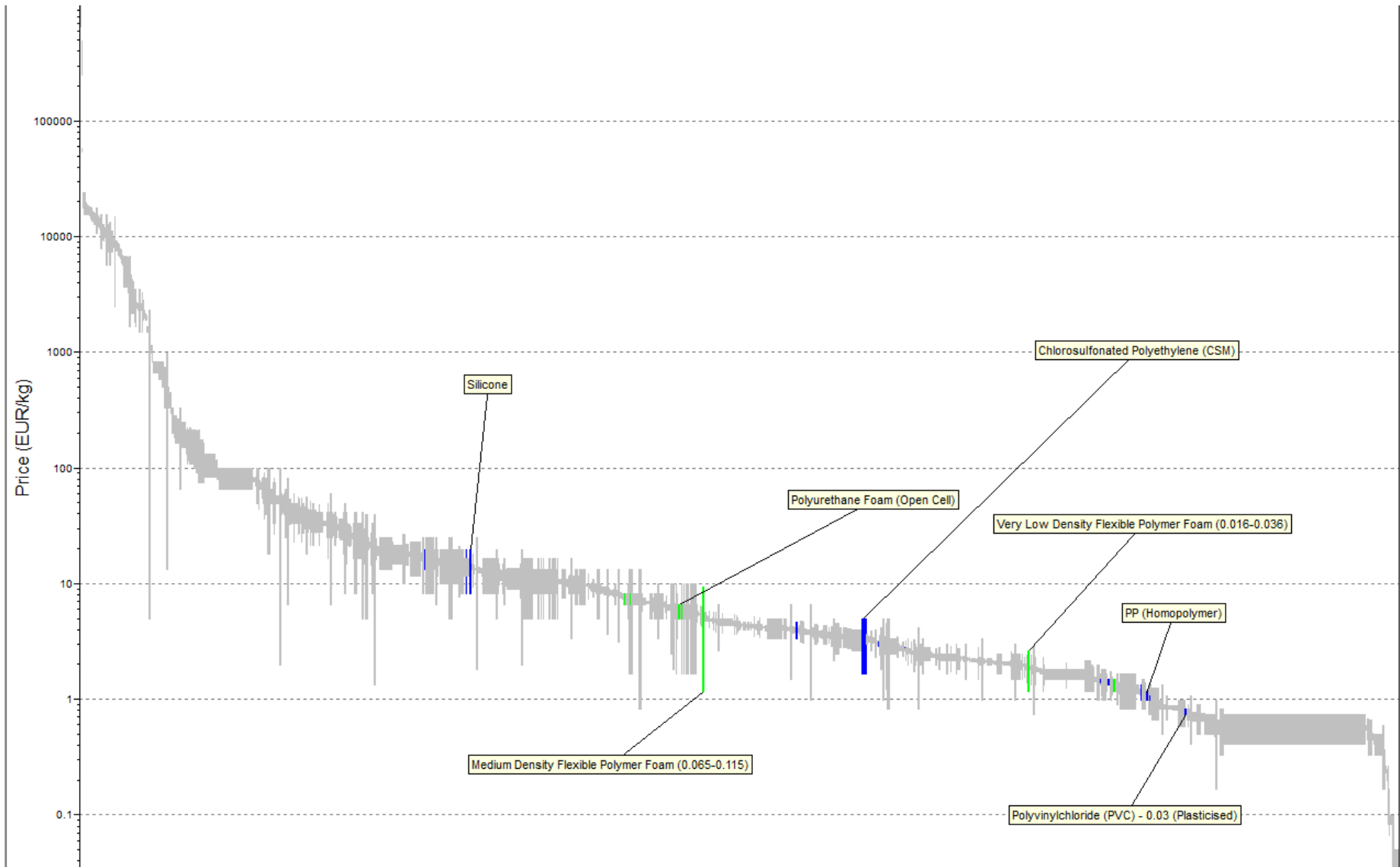
$$b \leq 3.3r \left( \frac{\sigma_f}{E} \right)$$

Índice

# Ejem 2: Materiales para juntas tóricas

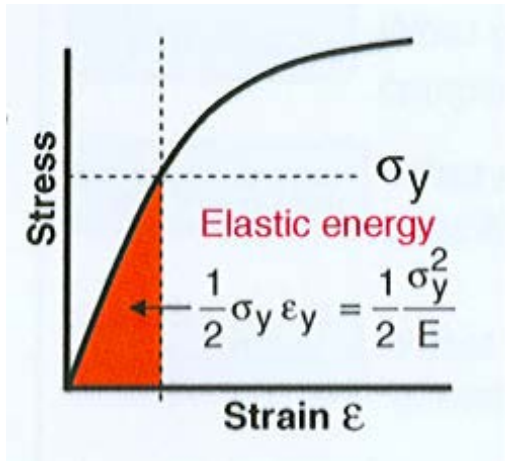


# Ejem 2: Materiales para juntas tóricas

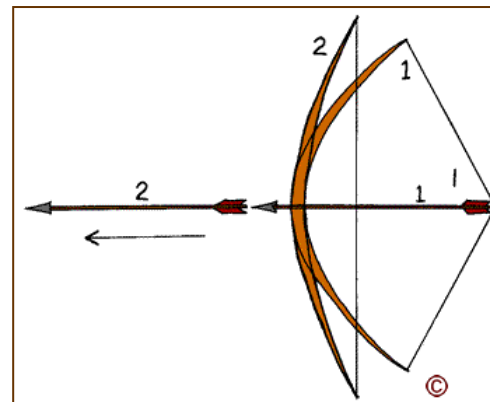


# Ejem 3: Material para un muelle

Seleccionar un material para fabricar un resorte. El material debe poder responder ante un choque de carga y tiene que operar en agua salina y agua dulce.



- Establecer los requerimientos de diseño (función, objetivo, restricciones), identificar los índices del material, crear los gráficos de selección.



A pole vaulter – the pole stores elastic energy.

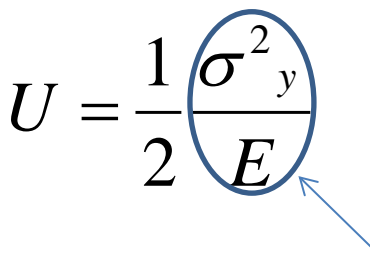
# Ejem 3: Material para un muelle

<b>Función</b>	Muelle
<b>Objetivo</b>	Maximizar la energía elástica almacenada (alto modulo de resiliencia $U_r$ )
<b>Límites</b>	<ul style="list-style-type: none"><li>• Tenacidad de fractura <math>&gt; 15\text{MPa}\cdot\text{m}^{1/2}</math></li><li>• Alta resistencia en agua salina y agua dulce</li><li>• Barato</li></ul>

**F. Objetivo** →  $U = \frac{1}{2} \frac{\sigma_y^2}{E}$

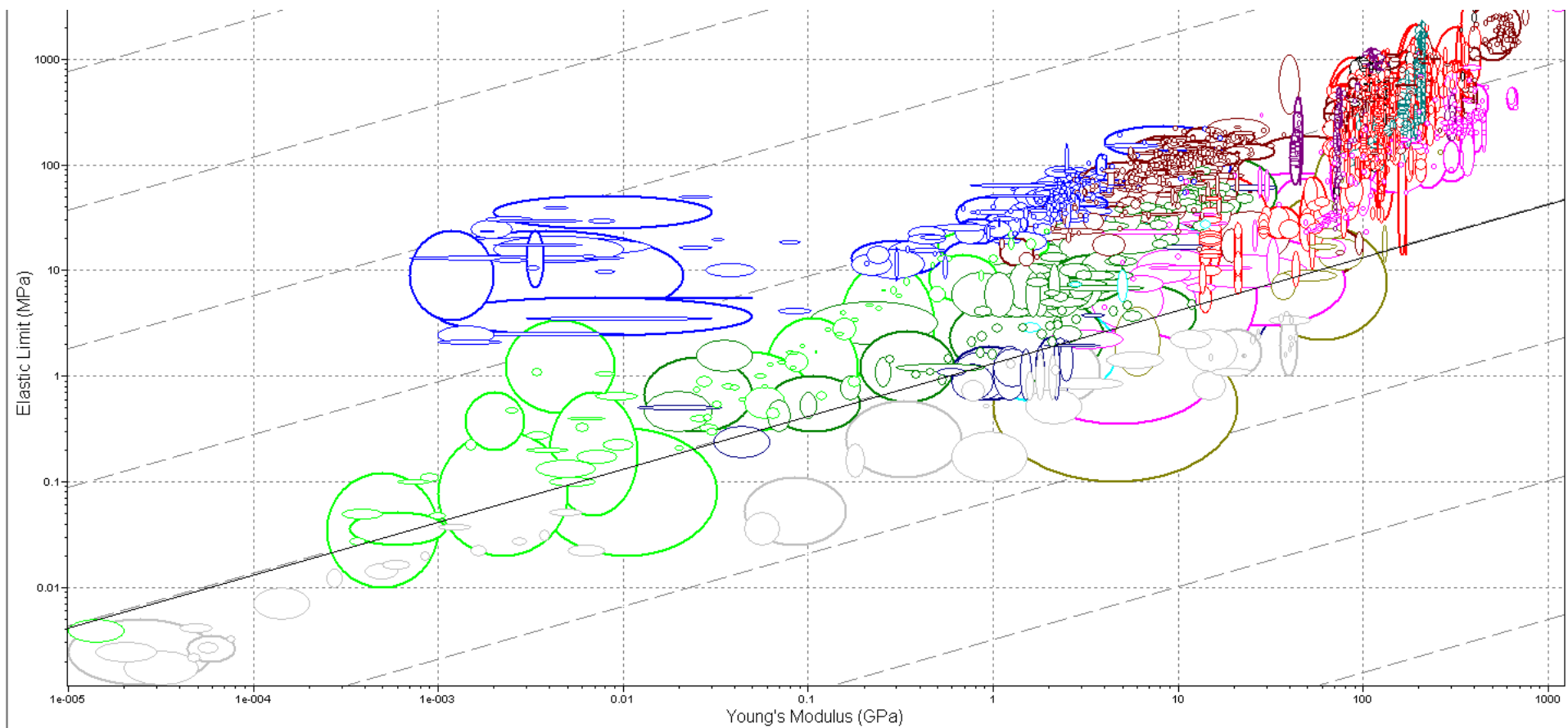
U es la resiliencia,  $\sigma_y$  es el límite elástico y E es el módulo de Young

Índice



Maximizar la resiliencia es maximizar el índice

# Ejem 3: Material para un muelle

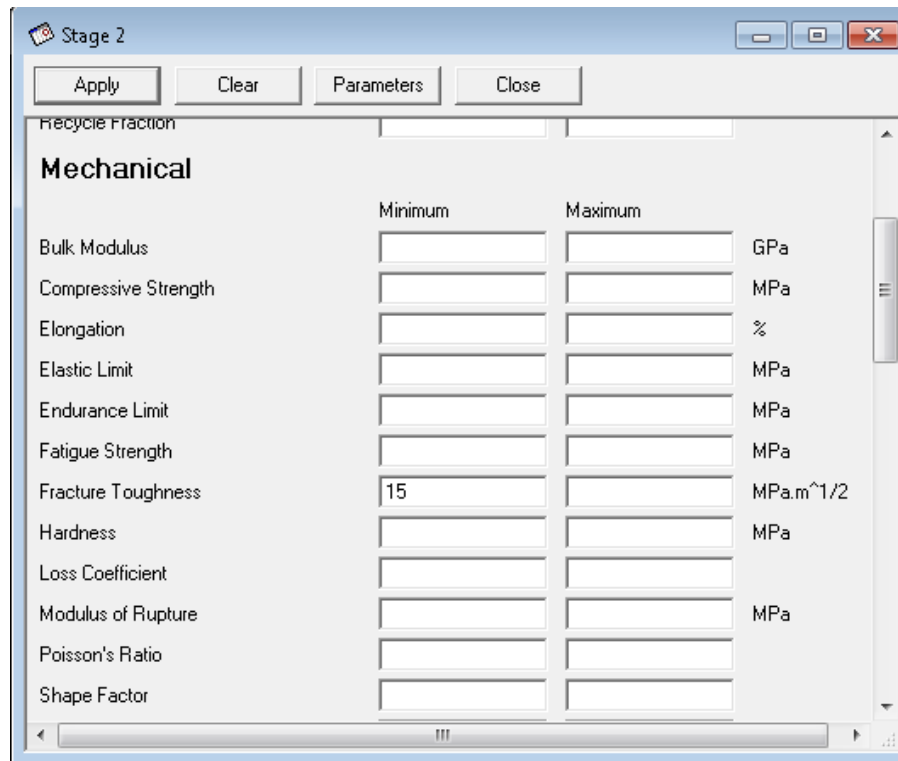


$$\text{Log}(\sigma_f) = 1/2 \text{ log } (E) + 1/2 \text{ log}(C) \rightarrow \text{pendiente} = 1/2$$

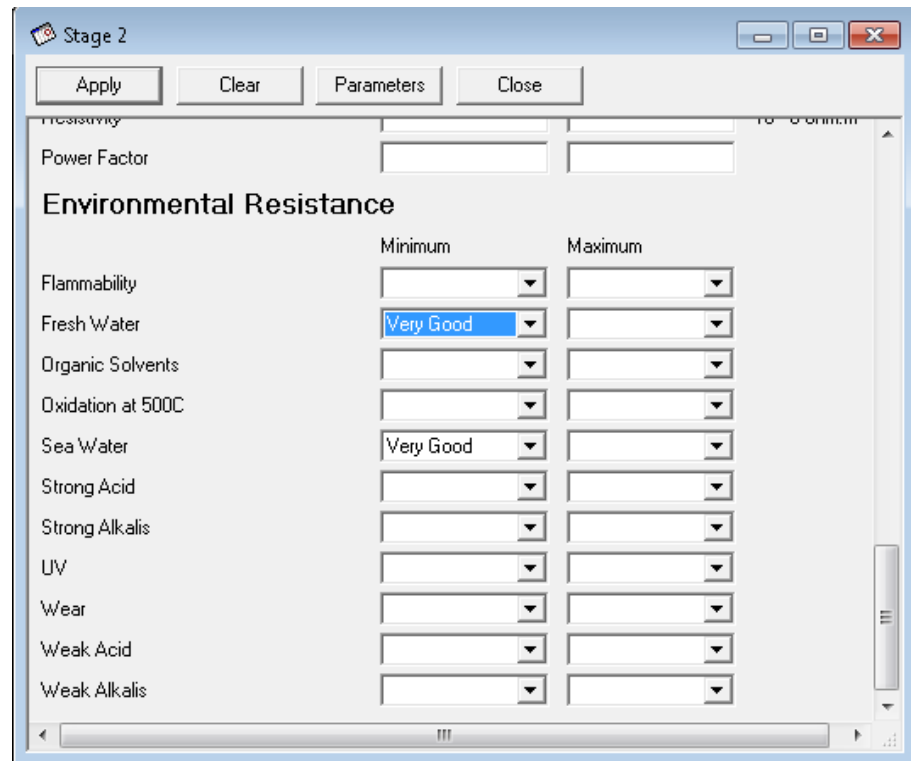


# Ejem 3: Material para un muelle

Introducimos límites de otras características:

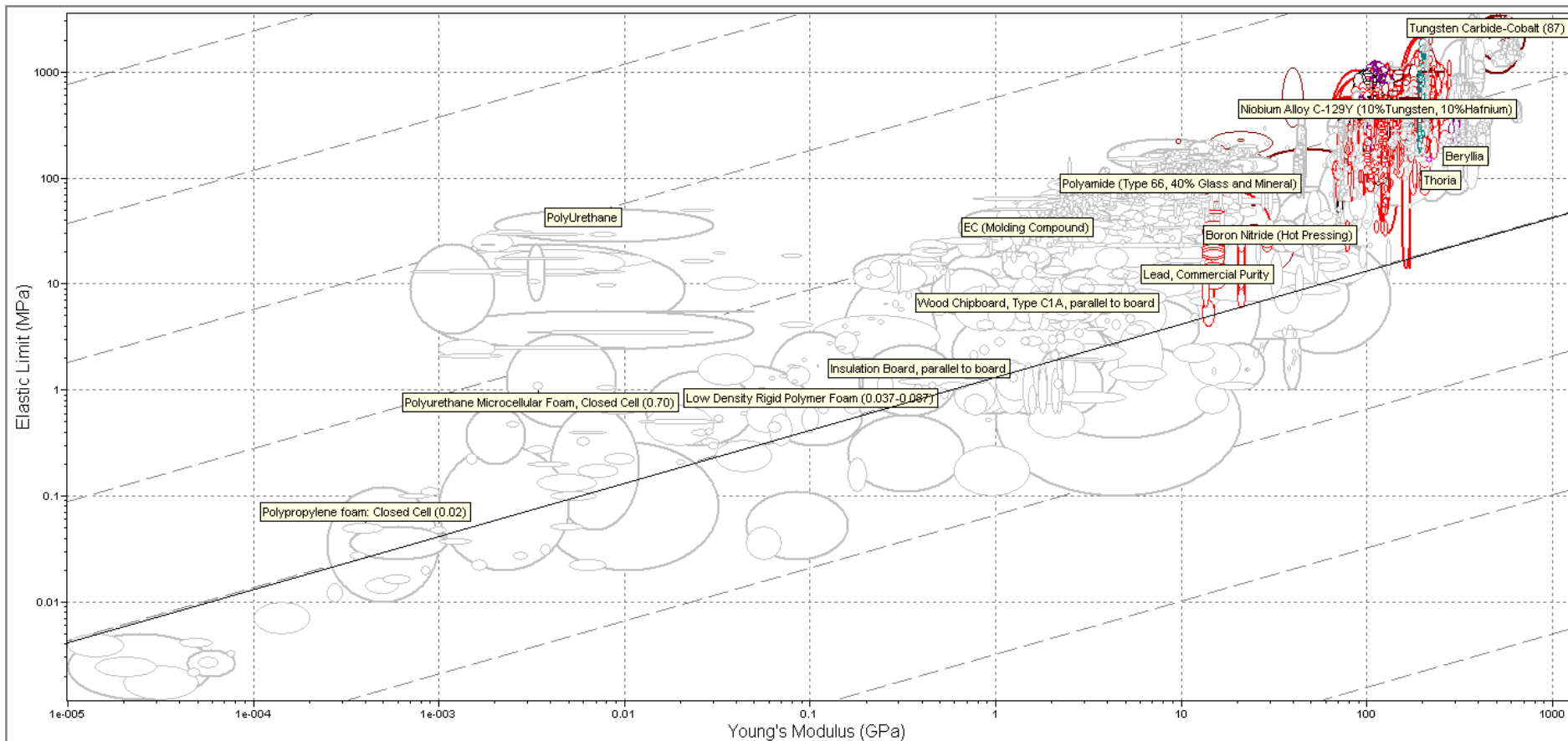


	Minimum	Maximum	
Bulk Modulus			GPa
Compressive Strength			MPa
Elongation			%
Elastic Limit			MPa
Endurance Limit			MPa
Fatigue Strength			MPa
Fracture Toughness	15		MPa.m <sup>1/2</sup>
Hardness			MPa
Loss Coefficient			
Modulus of Rupture			MPa
Poisson's Ratio			
Shape Factor			

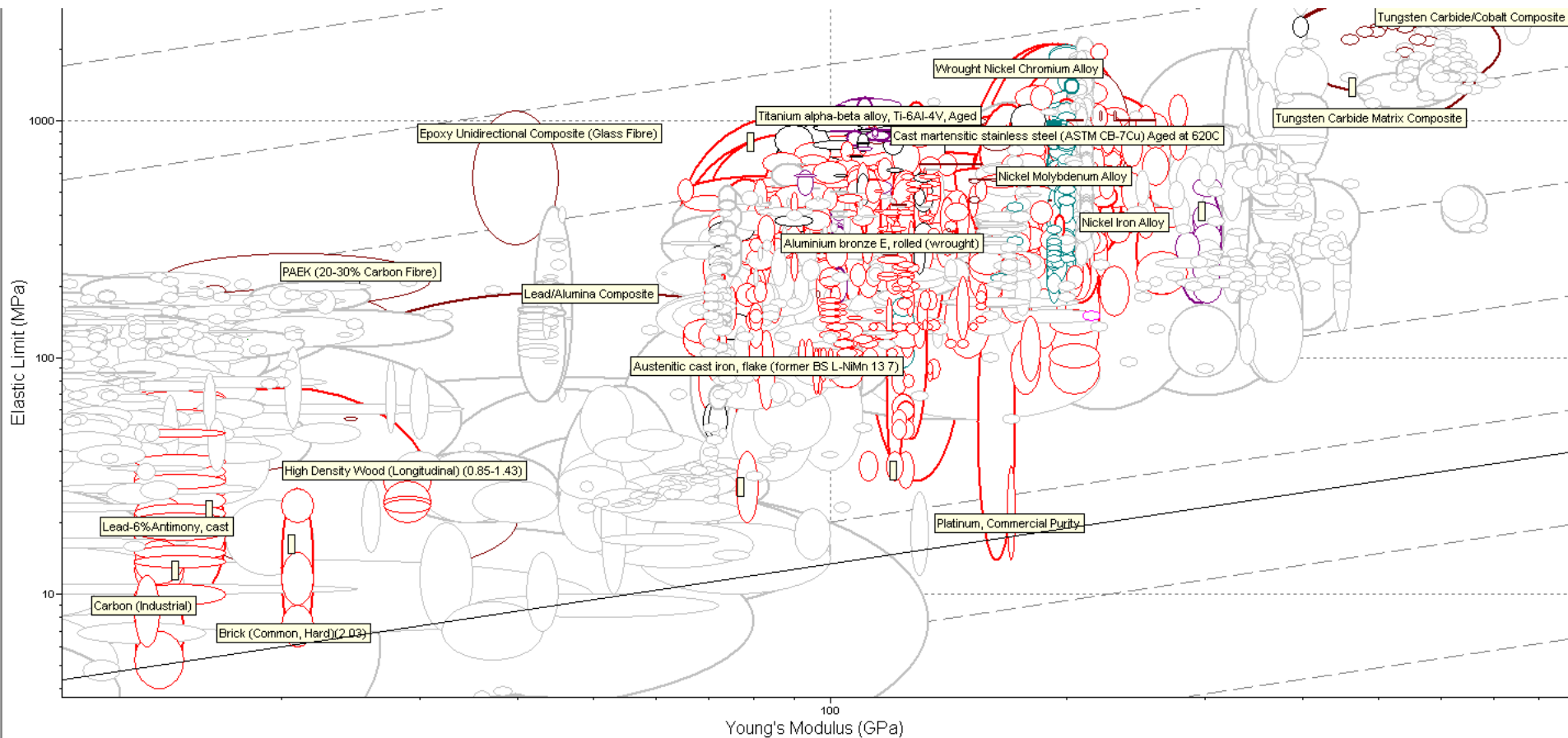


	Minimum	Maximum
Flammability		
Fresh Water	Very Good	
Organic Solvents		
Oxidation at 500C		
Sea Water	Very Good	
Strong Acid		
Strong Alkalis		
UV		
Wear		
Weak Acid		
Weak Alkalis		

# Ejem 3: Material para un muelle

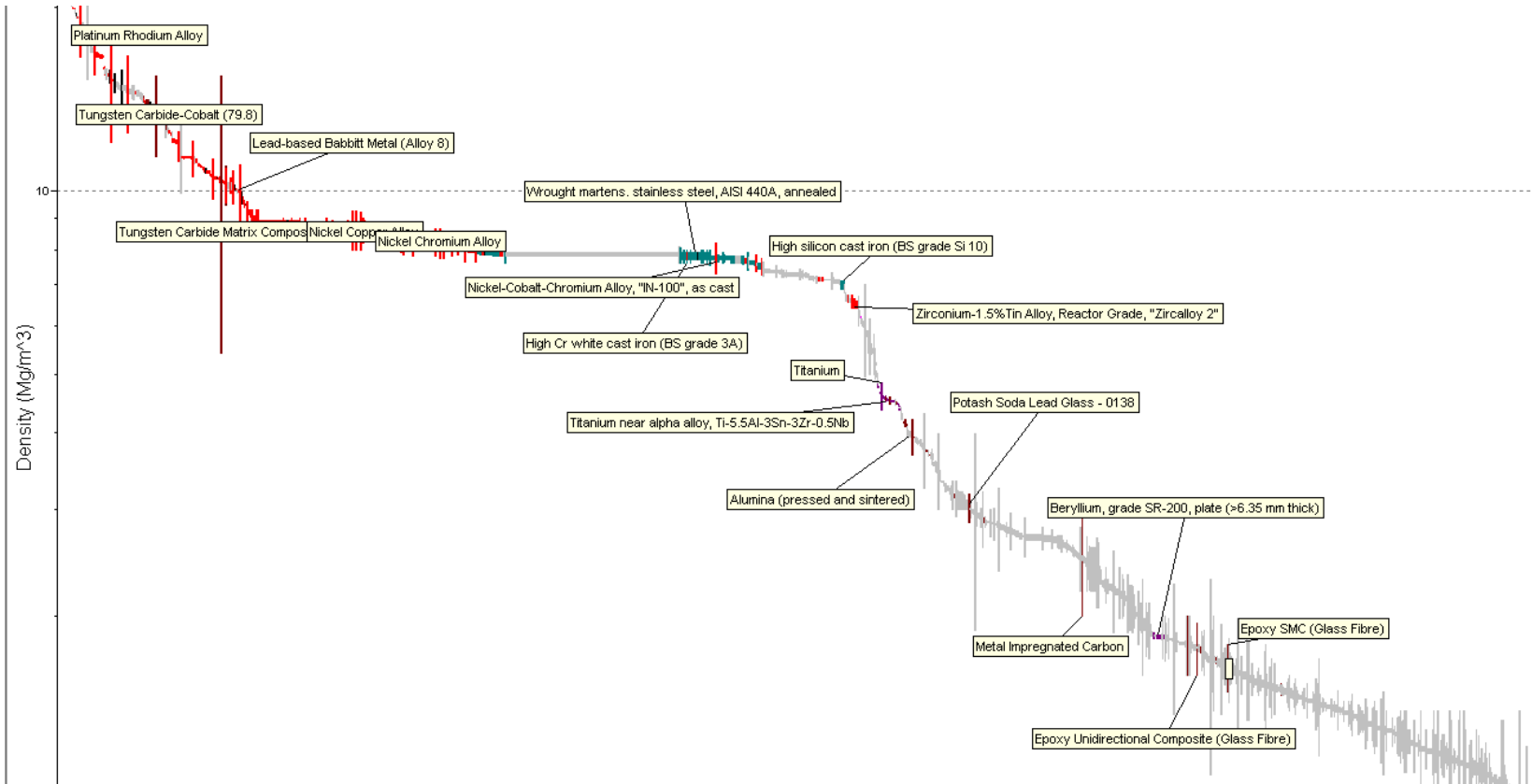


# Ejem 3: Material para un muelle



# Ejem 3: Material para un muelle

- Si el peso también es un parámetro a considerar:

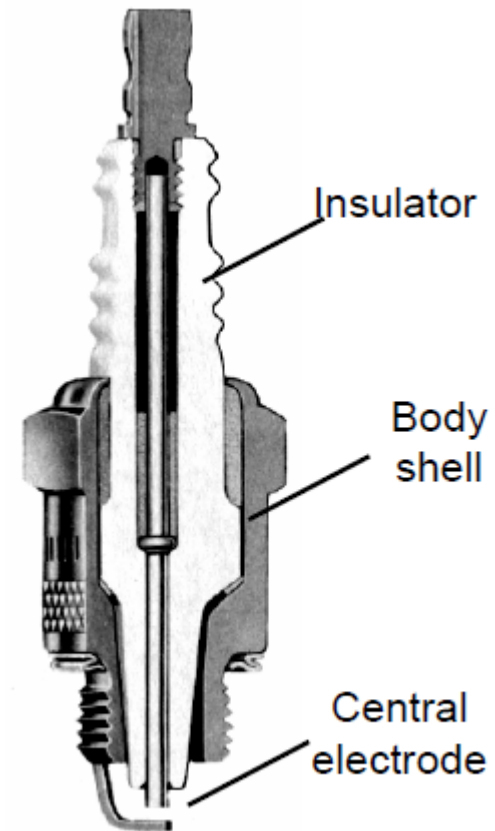


Material	$M_1 = \sigma_f^2 / \rho E$ (kJ/kg)	Comment
Ti alloys	0.9–2.6	Better than steel; corrosion-resistant; expensive
CFRP	3.9–6.5	Better than steel; expensive
GFRP	1.0–1.8	Better than spring steel; less expensive than CFRP
Spring steel	0.4–0.9	Poor, because of high density

# Ejem 4: Materiales para el aislante de una bujía

Se debe seleccionar un material para el aislante que recubre una bujía. Debe ser lo más barato posible además de satisfacer las condiciones necesarias.

- Establecer los requerimientos de diseño (función, objetivo, restricciones), identificar los índices del material, crear los gráficos de selección.



# Ejem 4: Materiales para el aislante de una bujía

<b>Función</b>	Aislar bujía
<b>Objetivo</b>	Minimizar costes.
<b>Límites</b>	<ul style="list-style-type: none"><li>• <math>V_{\max} &lt; 2 \cdot 10^7 \text{ V/m}</math></li><li>• <math>T_{\max} &gt; 600 \text{ °C} = 873 \text{ K}</math></li></ul>

**F. Límite →**       $\varepsilon = \alpha \Delta T$       donde  $\varepsilon$  es la deformación térmica que sufre el material al experimentar un incremento de temperatura  $\Delta T$ , con  $\alpha$  siendo el coeficiente de expansión térmica

$\sigma = E \varepsilon$       donde  $\sigma$  es la tensión térmica que sufre un material con módulo de Young  $E$  si se deforma térmicamente  $\varepsilon$

$\sigma = E \varepsilon < \sigma_{el}$       ← La tensión debida a las variaciones térmicas debe ser menor que el límite elástico

# Ejem 4: Materiales para el aislante de una bujía

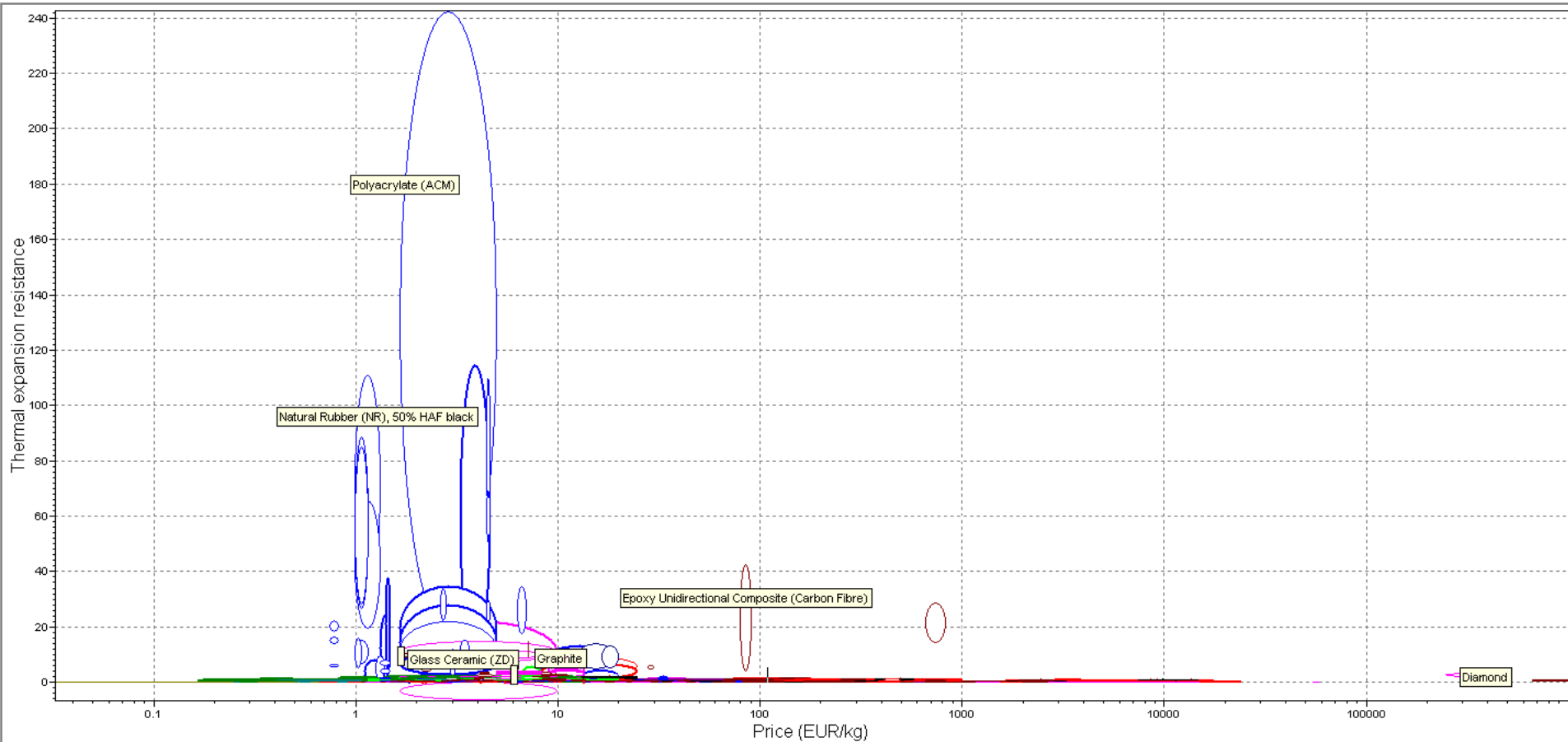
<b>Función</b>	Aislar bujía
<b>Objetivo</b>	Minimizar costes.
<b>Límites</b>	<ul style="list-style-type: none"><li>• <math>V_{\max} &lt; 2 \cdot 10^7 \text{ V/m}</math></li><li>• <math>T_{\max} &gt; 600 \text{ °C} = 873 \text{ K}</math></li></ul>

combinando ambas ecuaciones →

$$\Delta T_{\max} = \frac{\sigma_{el}}{E\alpha}$$

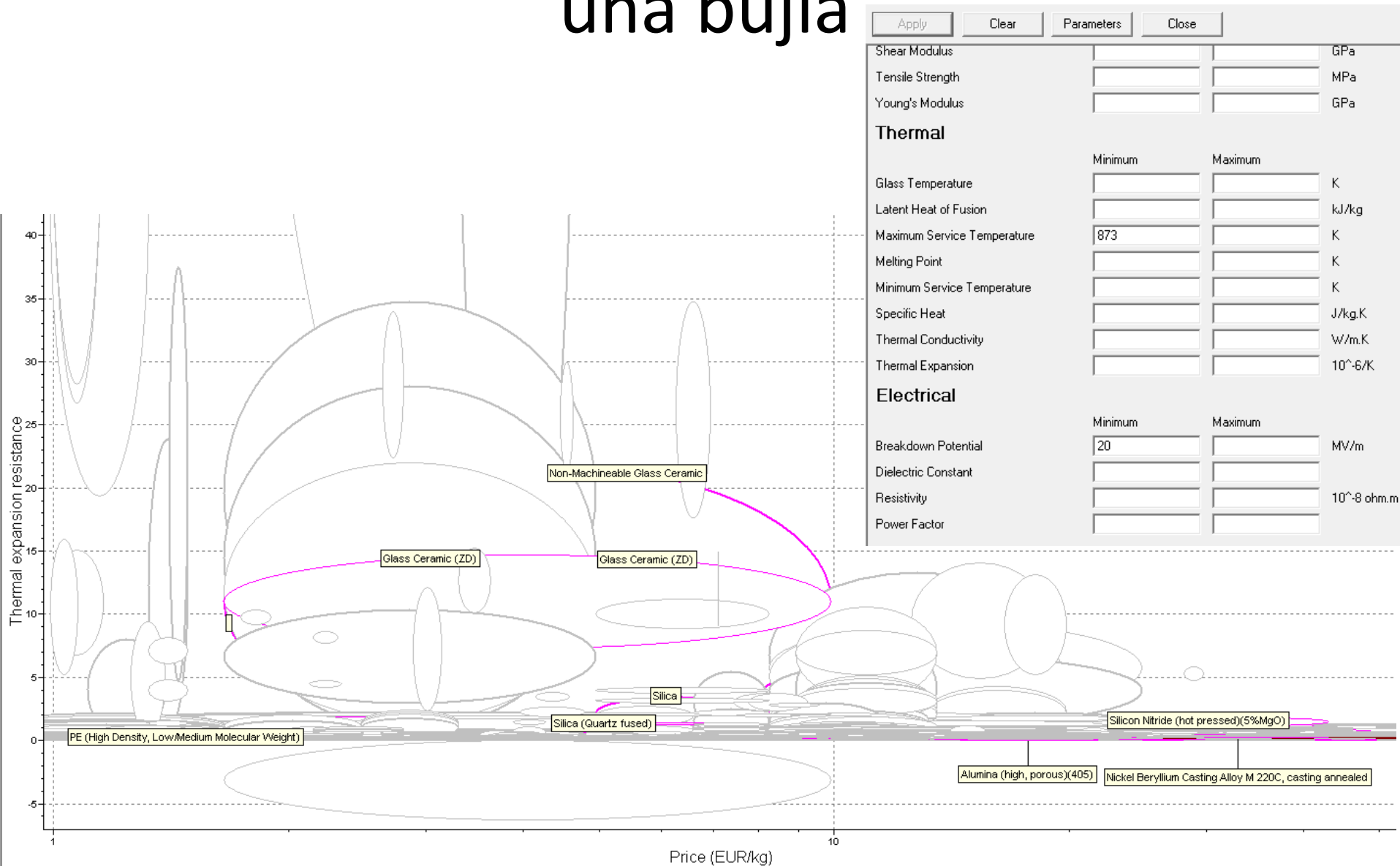
Representamos  $\Delta T$  frente al precio:

# Ejem 4: Materiales para el aislante de una bujía

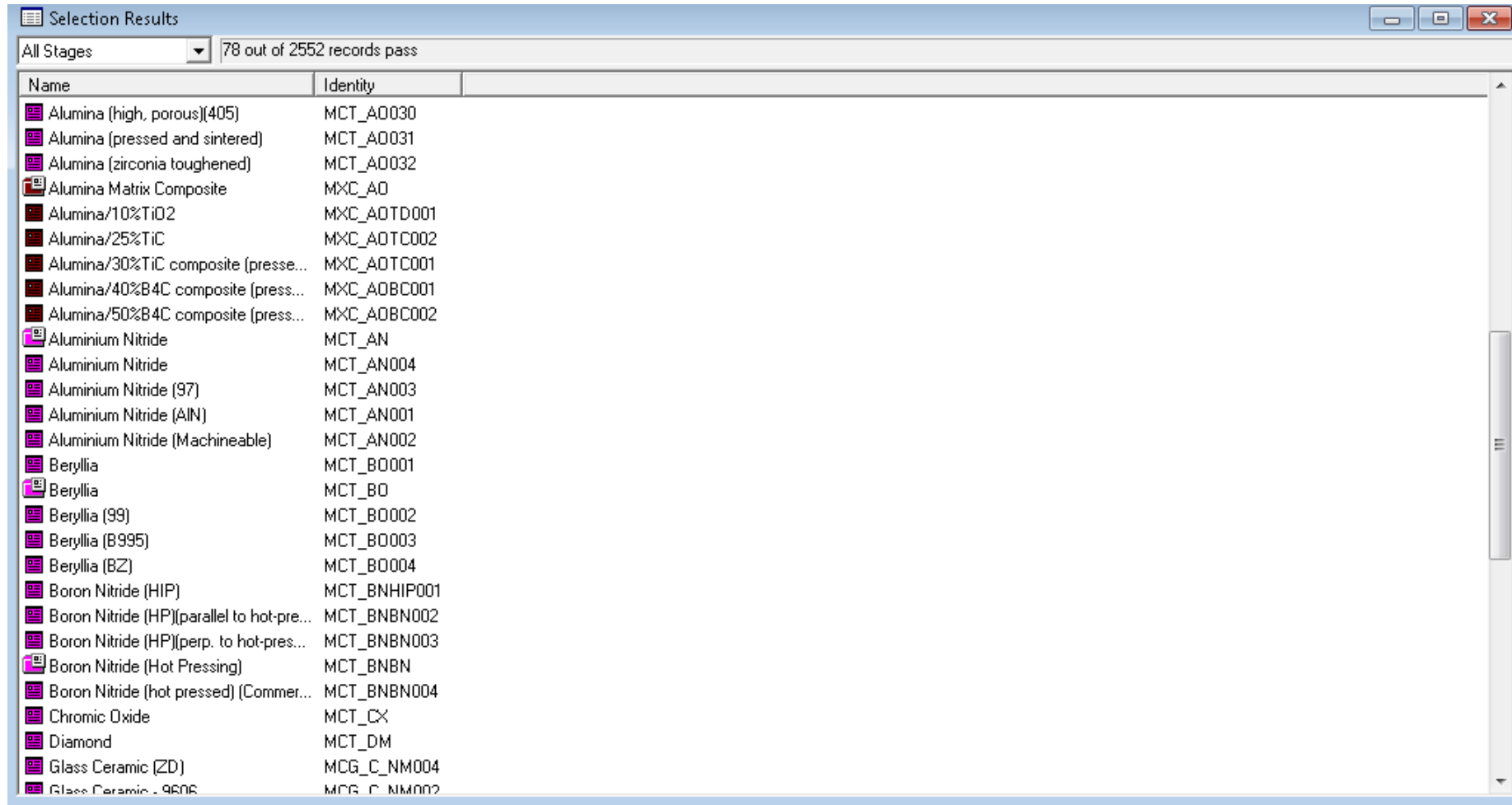




# Ejem 4: Materiales para el aislante de una bujía



# Ejem 4: Materiales para el aislante de una bujía



The screenshot shows a software window titled "Selection Results". At the top, there is a dropdown menu set to "All Stages" and a status bar indicating "78 out of 2552 records pass". Below this is a table with two columns: "Name" and "Identity". The table lists various ceramic materials, each preceded by a small icon. The materials include different grades of alumina, alumina matrix composites, alumina with various additives (TiO2, TiC, B4C), aluminium nitride, beryllia, boron nitride, chromic oxide, diamond, and glass ceramic.

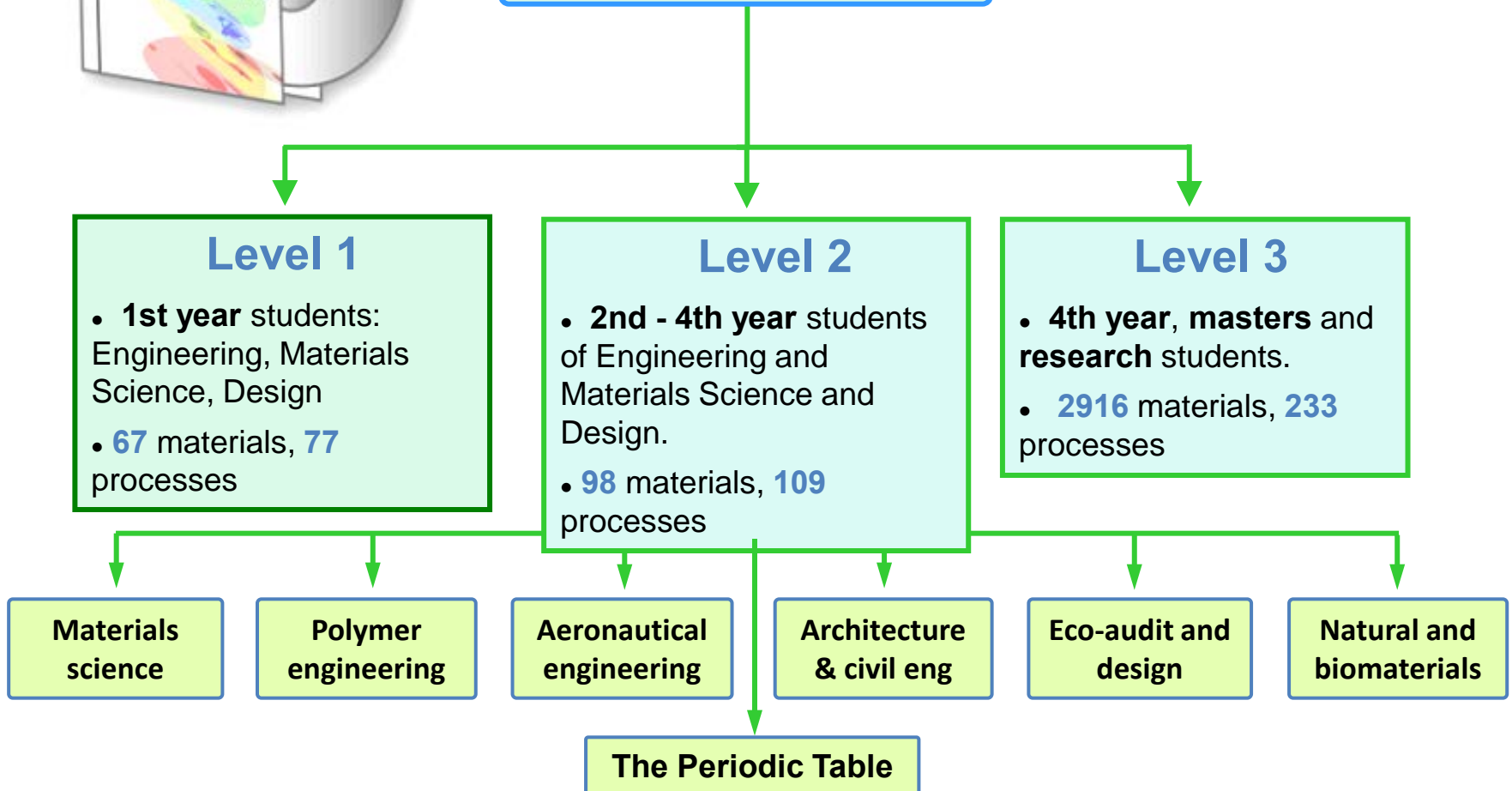
Name	Identity
Alumina (high, porous)(405)	MCT_A0030
Alumina (pressed and sintered)	MCT_A0031
Alumina (zirconia toughened)	MCT_A0032
Alumina Matrix Composite	MXC_A0
Alumina/10%TiO2	MXC_A0TD001
Alumina/25%TiC	MXC_A0TC002
Alumina/30%TiC composite (presse...	MXC_A0TC001
Alumina/40%B4C composite (press...	MXC_A0BC001
Alumina/50%B4C composite (press...	MXC_A0BC002
Aluminium Nitride	MCT_AN
Aluminium Nitride	MCT_AN004
Aluminium Nitride (97)	MCT_AN003
Aluminium Nitride (AlN)	MCT_AN001
Aluminium Nitride (Machineable)	MCT_AN002
Beryllia	MCT_B0001
Beryllia	MCT_B0
Beryllia (99)	MCT_B0002
Beryllia (B995)	MCT_B0003
Beryllia (BZ)	MCT_B0004
Boron Nitride (HIP)	MCT_BNHIP001
Boron Nitride (HP)(parallel to hot-pre...	MCT_BNBN002
Boron Nitride (HP)(perp. to hot-pres...	MCT_BNBN003
Boron Nitride (Hot Pressing)	MCT_BNBN
Boron Nitride (hot pressed) (Commer...	MCT_BNBN004
Chromic Oxide	MCT_CX
Diamond	MCT_DM
Glass Ceramic (ZD)	MCG_C_NM004
Glass Ceramic - 9606	MCG_C_NM002

# Tutorial breve del CES EduPack

# CES EduPack 09



## The CES EduPack 09



# Generando los gráficos de propiedades

File Edit View Select Tools Window Help Feature request

Toolbar →

Browse

Search

**Select**

Print

Search web

1. Selection data

Pick a selection template

**Custom**

Define your own subset

**Edu Level 1**

Materials

Processes .....

**Edu Level 2**

Materials

Materials with Durability

props

Materials with Eco properties

Processes .....

# Generando los gráficos de propiedades

File Edit View Select Tools Window Help Feature request

*Toolbar* →



## Edu Level 2 Materials

### 2. Selection Stages



tree

Plotting and selection tools

# Generando los gráficos de propiedades

File Edit View Select Tools Window Help Feature request

Toolbar →

Browse

Search

**Select**

Print

Search web

**Edu Level 2 Materials**

**2. Selection Stages**



**Graph**



**Limit**



**Choose:**

**X-axis**

**Y-axis**

**List of  
properties**

- Density
- Yield strength
- Young's modulus
- etc

# Generando los gráficos de propiedades

File Edit View Select Tools Window Help Feature request

Toolbar →

Browse

Search

**Select**

Print

Search web

Edu Level 2 Materials

2. Selection Stages

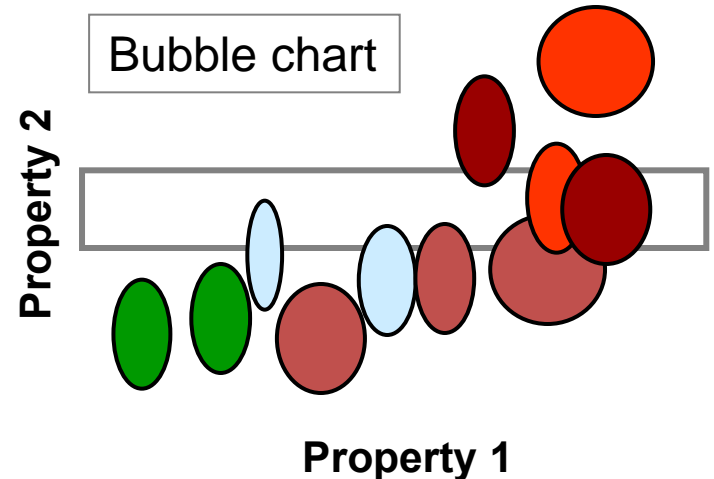
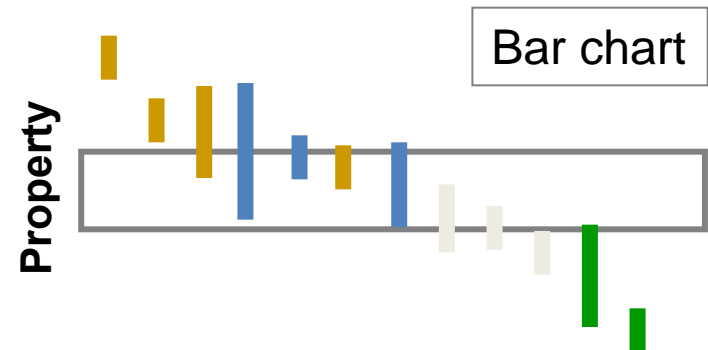


Graph

Free



Limit





# Generando los gráficos de propiedades

File Edit View Select Tools Window Help Feature request

Browse

Search

Select

Print

Search web

## 1. Selection data

Edu Level 2: Materials

## 2. Selection Stages



Graph



Limit



X-axis

Y-axis

Advanced

Modulus/ Density

List of properties

- Density
- Yield strength
- Young's modulus
- etc

+ - / \* ^ ( )

List of properties

- Density
- Yield strength
- Young's modulus
- etc

# Generando los gráficos de propiedades

File Edit View Select Tools Window Help Feature request

Browse

Search

Select

Print

Search web

## 1. Selection data

Edu Level 2: Materials

## 2. Selection Stages



tree

Graph



Limit



Modulus / Density

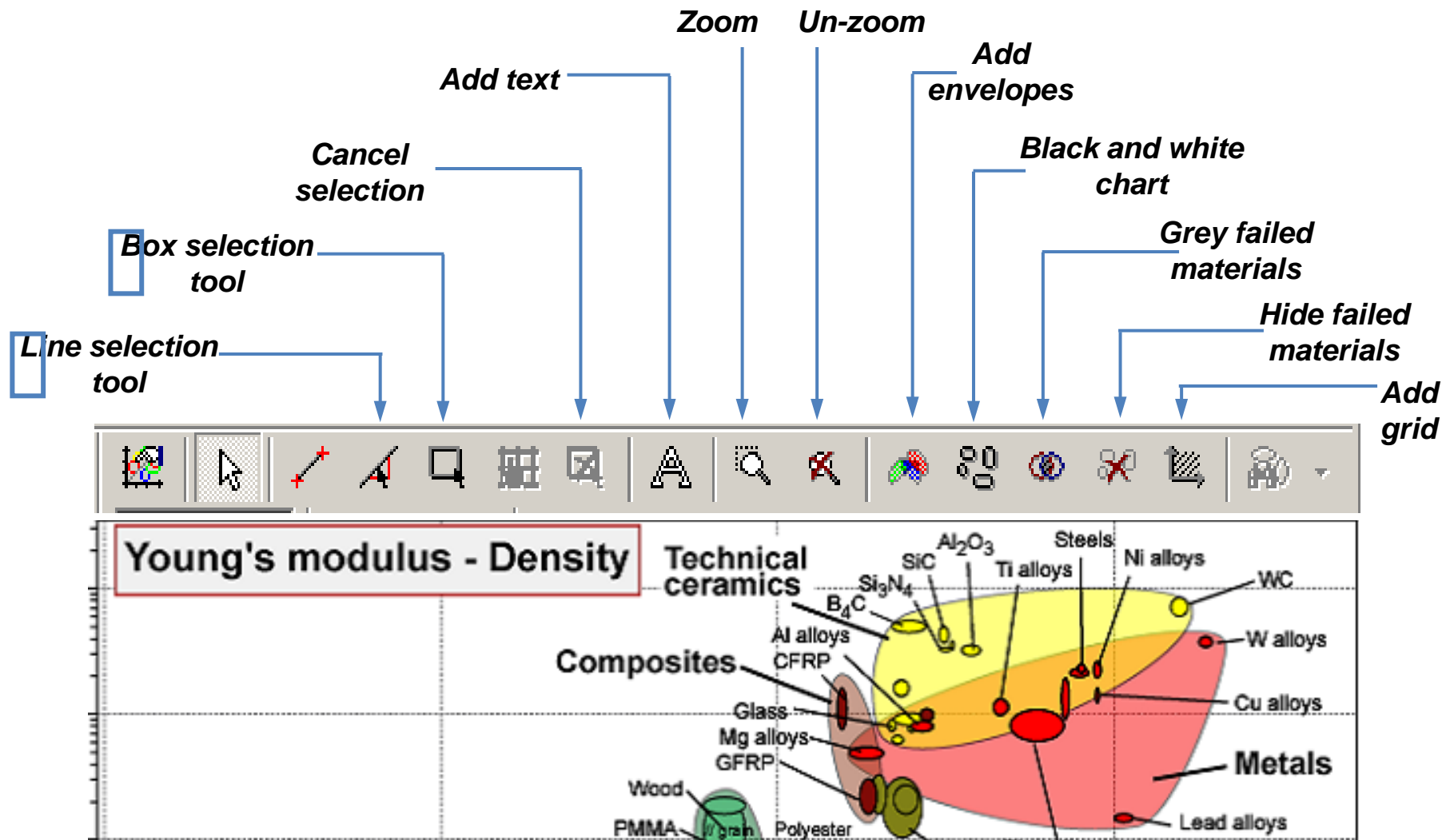
Bar chart

Modulus / Density

Bubble chart

Yield strength / Density

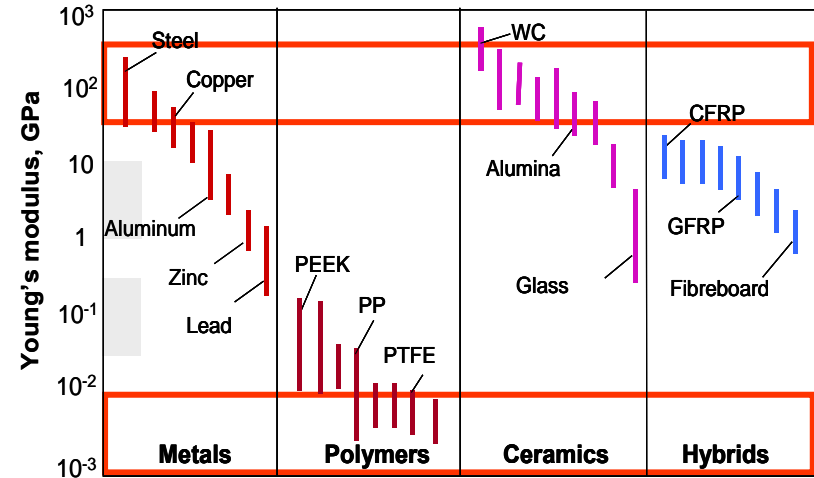
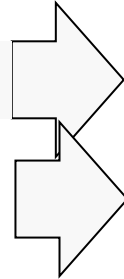
# Generando los gráficos de propiedades



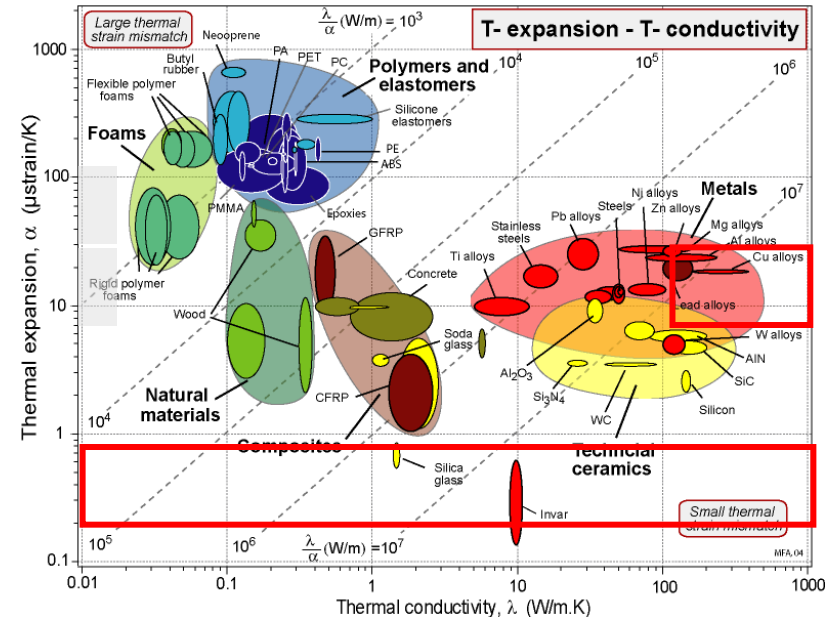
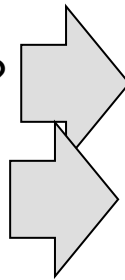
# Selección elemental

CES Selector es una herramienta digital:

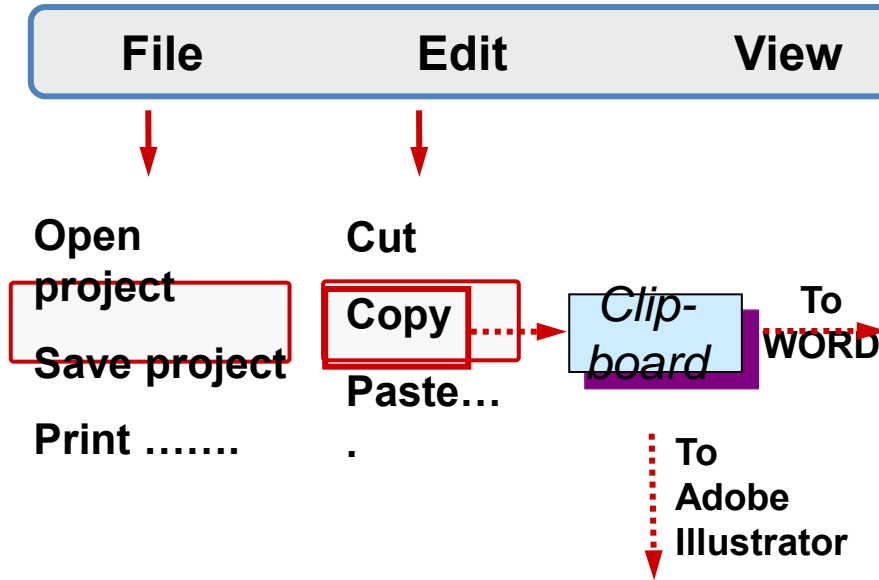
- ¿Materiales con rigidez alta?
- ¿Materiales con rigidez baja?



- ¿Materiales con conductividad alta?
- ¿Materiales con baja expansión?



# Elaborando el informe



## Acrylonitrile-butadiene-styrene (ABS) - $(\text{CH}_2\text{-CH-C}_6\text{H}_4)_n$

### General Properties

Density	1.05 - 1.07	Mg/m <sup>3</sup>
Price	2.1 - 2.3	US \$/kg

### Mechanical Properties

Young's Modulus	1.1 - 2.9	GPa
Elastic Limit	18 - 50	MPa
Tensile Strength	27 - 55	MPa
Elongation	6 - 8	%
Hardness - Vickers	6 - 15	HV
Endurance Limit	11 - 22	MPa
Fracture Toughness	1.2 - 4.2	MPa.m <sup>1/2</sup>

### Thermal Properties

Max Service Temp	350 - 370	K
Thermal Expansion	70 - 75	10 <sup>-6</sup> /K
Specific Heat	1500 - 1510	J/kg K
Thermal Conductivity	0.17 - 0.24	W/m K

### Electrical Properties

Conductor or insulator?	Good insulator
-------------------------	----------------

### Optical Properties

Transparent or opaque?	Opaque
------------------------	--------

### Eco Properties

Energy content	91 - 110	MJ/kg
CO <sub>2</sub> per kg	3.2 - 3.6	kg/kg

### Corrosion and Wear Resistance

Flammability	Average
Fresh Water	Good
Organic Solvents	Average
Sea Water	Good
UV	Good
Wear	Poor
etc	

**What is it?** ABS (Acrylonitrile-butadiene-styrene) is tough, resilient, and easily molded. It is usually opaque, although some grades can now be transparent, and it can be given vivid colors. ABS-PVC alloys are tougher than standard ABS and, in self-extinguishing grades, are used for the casings of power tools.

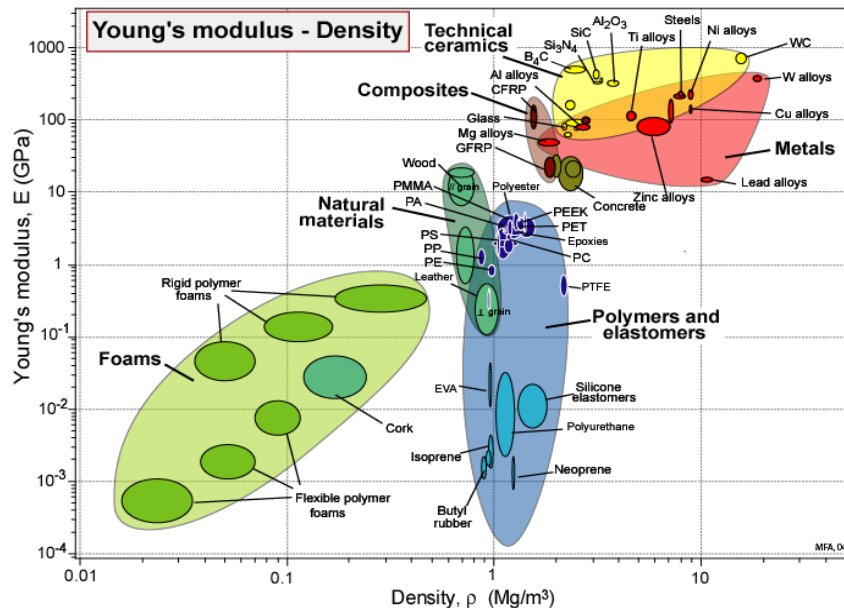
**Design guidelines.** ABS has the highest impact resistance of all polymers. It takes color well. Integral metallics are possible (as in GE Plastics' Magix). ABS is UV resistant for outdoor application if stabilizers are added. It is hygroscopic (may need to be oven dried before thermoforming) and can be damaged by petroleum-based machining oils.

ABS can be extruded, compression moulded or formed to sheet that is then vacuum thermoformed. It can be joined by ultrasonic or hot-plate welding, or bonded with polyester, epoxy, isocyanate or nitrile phenolic adhesives.

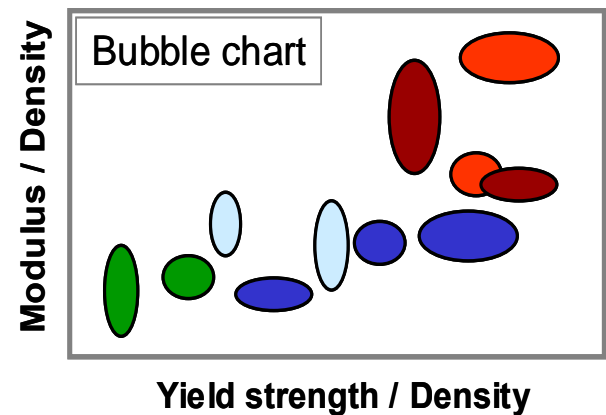
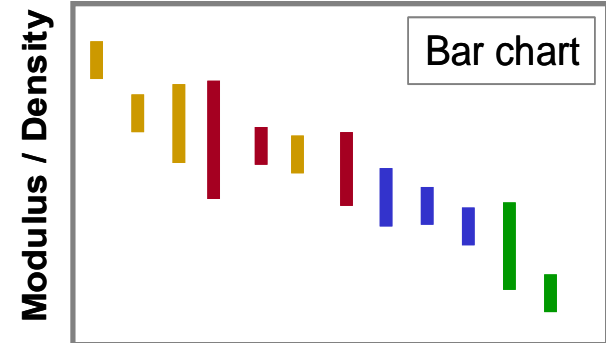
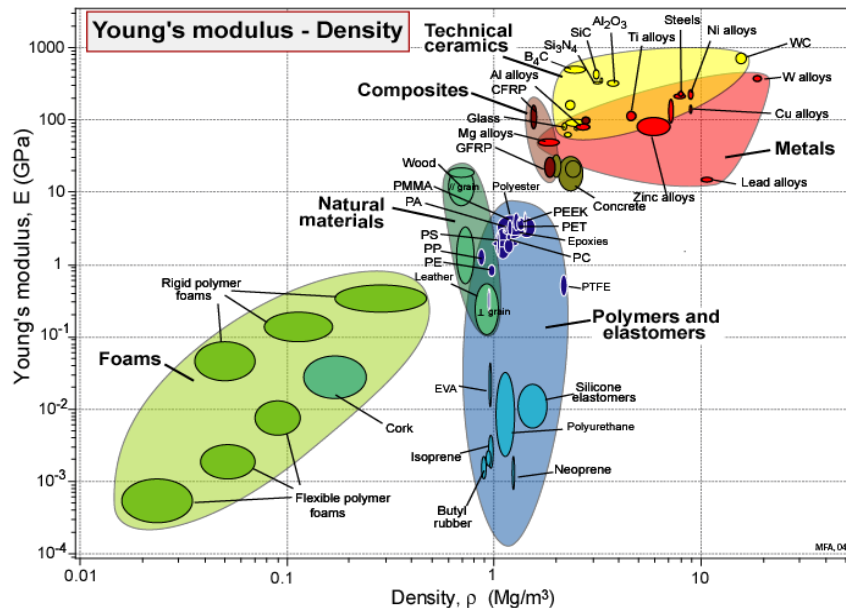
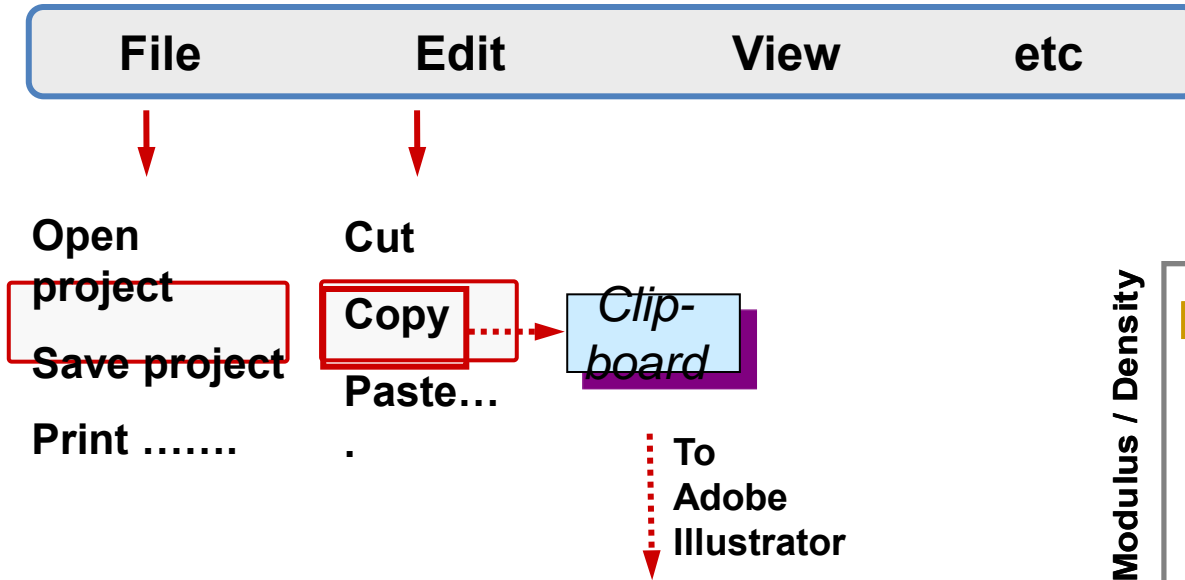
**Technical notes.** ABS is a terpolymer - one made by copolymerising 3 monomers: acrylonitrile, butadiene and styrene. The acrylonitrile gives thermal and chemical resistance, rubber-like butadiene gives ductility and strength, the styrene gives a glossy surface, ease of machining and a lower cost. In ASA, the butadiene component (which gives poor UV resistance) is replaced by an acrylic ester. Without the addition of butyl, ABS becomes SAN - a similar material with lower impact resistance or toughness. It is the stiffest of the thermoplastics and has excellent resistance to acids, alkalis, salts and many solvents.

**Typical Uses.** Safety helmets; camper tops; automotive instrument panels and other interior components; pipe fittings; home-security devices and housings for small appliances; communications equipment; business machines; plumbing hardware; automobile grilles; wheel covers; mirror housings; refrigerator liners; luggage shells; tote trays; mower shrouds; boat hulls; large components for recreational vehicles; weather seals; glass beading; refrigerator breaker strips; conduit; pipe for drain-waste-vent (DWV) systems.

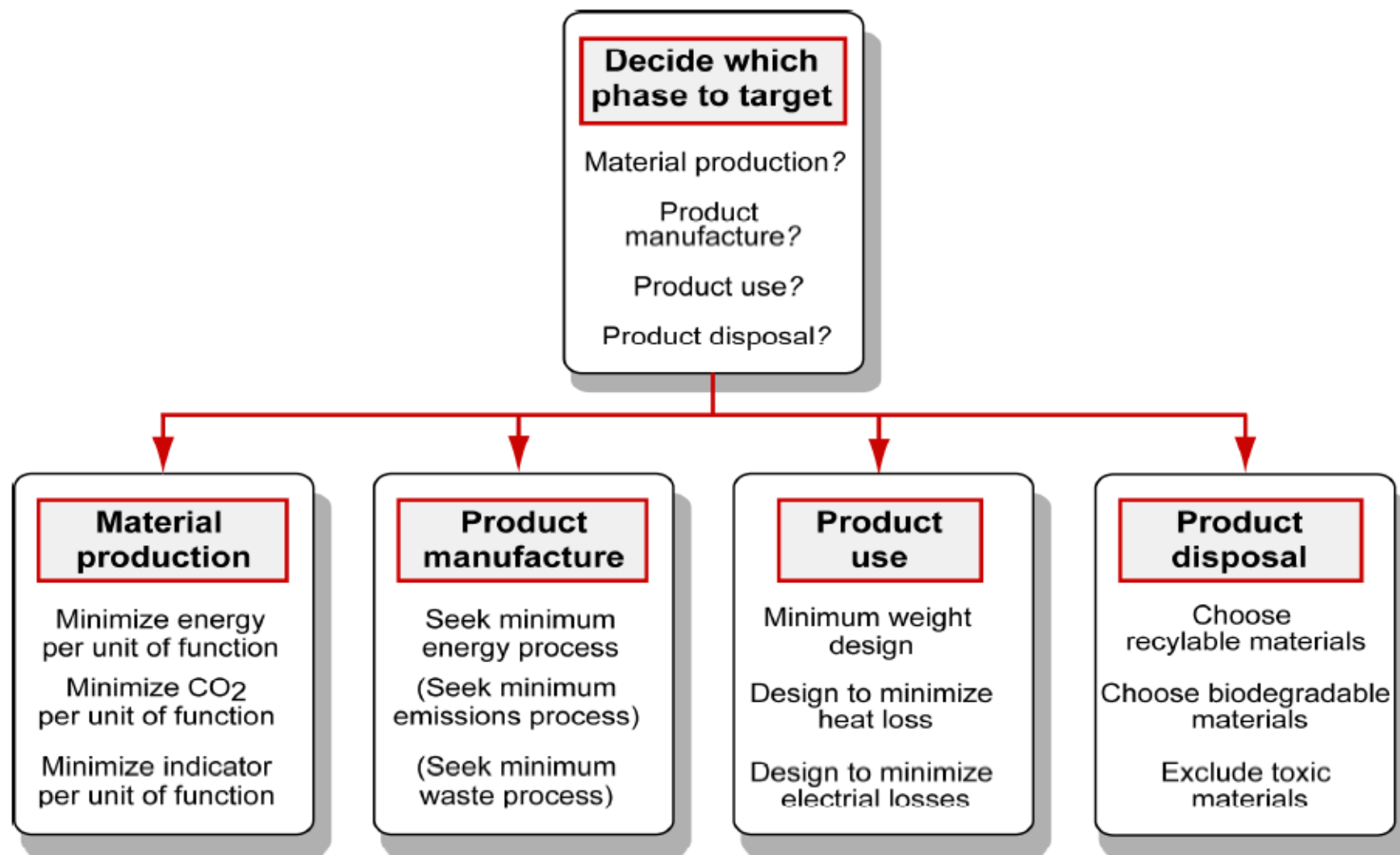
**The environment.** The acrylonitrile monomer is nasty stuff, almost as poisonous as cyanide. Once polymerized with styrene it becomes harmless. ABS is FDA compliant, can be recycled, and can be incinerated to recover the energy it contains.



# Elaborando el informe



# Eco-selection: consideraciones medioambientales



*Figure 8. Rational use of the Eco Selector data starts with an analysis of the phase of life to be targeted. The decision then guides the method of selection to minimize the impact of the phase on the environment.*



# CES Eco-audit

## User inputs

### ***User interface***

- ***Bill of materials***
- ***Shaping process***
- ***Transport needs***
- ***Duty cycle***
- ***etc***

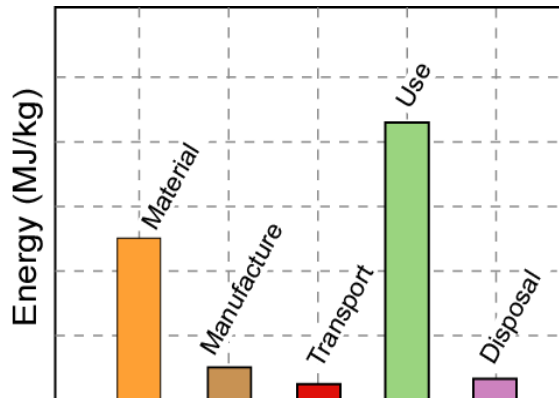


## Data from CES

### ***Eco database***

- ***Embodied energies***
- ***Process energies***
- ***CO<sub>2</sub> footprints***
- ***Unit transport energies***
- ***etc***

## ***Eco audit model***

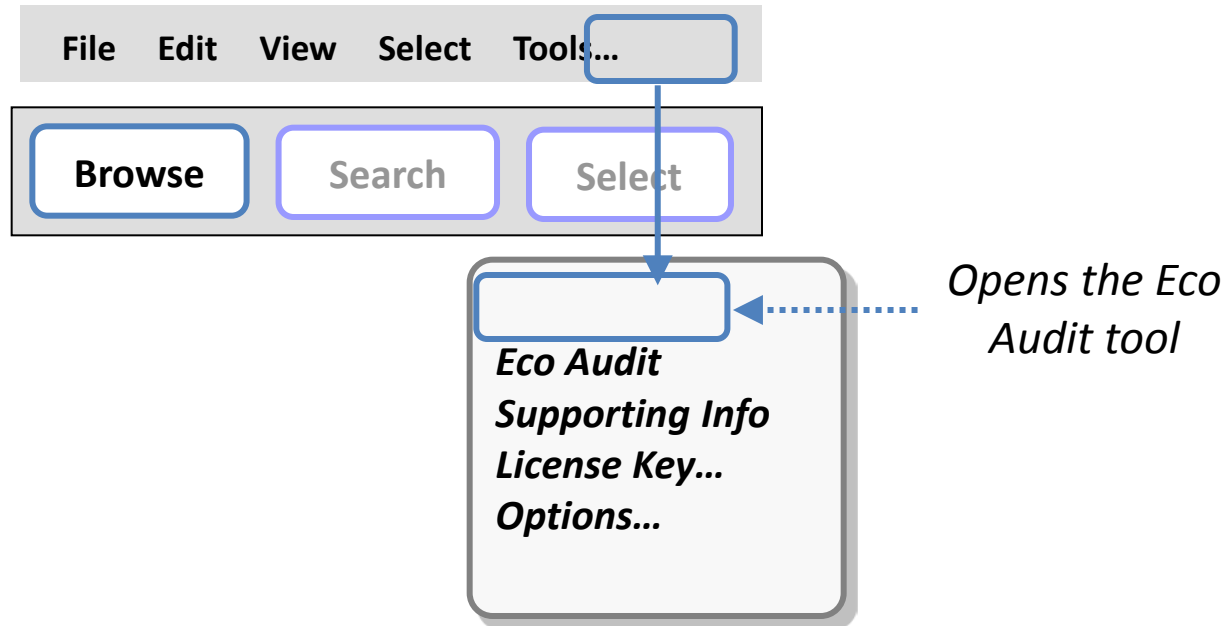


## Outputs

### ***Tabular data***

- ***Summary sheet***
- ***Detailed breakdown***
- ***Life phase energies***
- ***Life carbon footprints***
- ***etc***

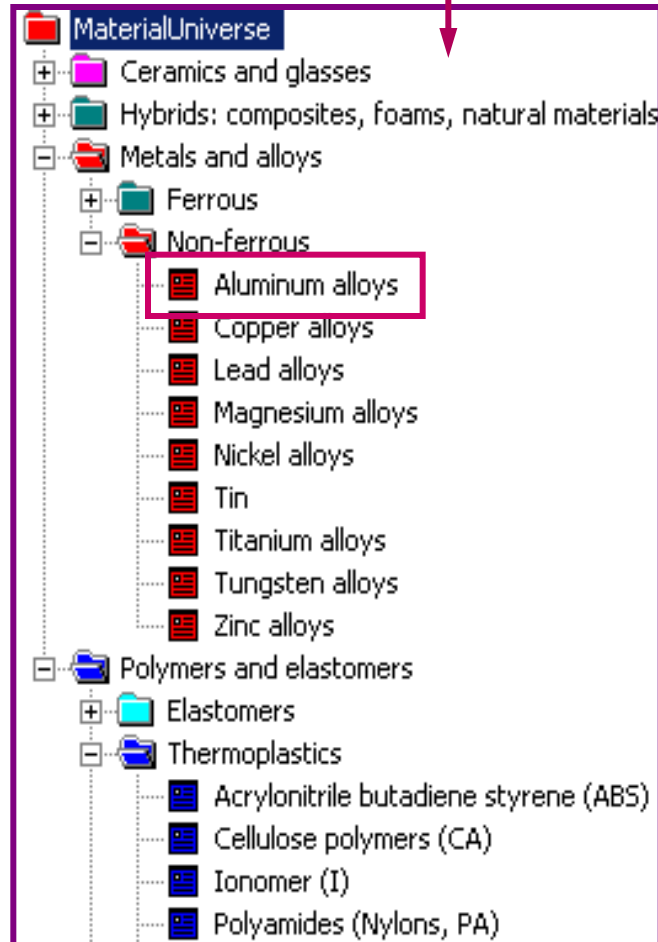
# Opening the Eco-audit tool



# Material and process energy / CO<sub>2</sub>

No.	Name	Material	Process	Mass (kg)	End of life
1	Component 1				

*CES  
materials  
tree*



# Material and process energy / CO<sub>2</sub>

No.	Name	Material	Process	Mass (kg)	End of life
1	Component 1	Aluminum alloys ▼	<div><div>▼</div><div><ul style="list-style-type: none"><li>• Casting</li><li>• Vaporization</li><li>• Forging / rolling</li><li>• Powder methods</li></ul></div></div>		▼

*Available processes*

# Material and process energy / CO<sub>2</sub>

No.	Name	Material	Process	Mass (kg)	End of life
1	Component 1	Aluminum alloys ▼	Casting ▼	2.3	<div><div>▼</div><div><ul style="list-style-type: none"><li>• Reuse</li><li>• Refurbish</li><li>• Recycle</li><li>• Combust</li><li>• Landfill</li></ul></div></div> <div>End of life options</div>

# Material and process energy / CO<sub>2</sub>

No.	Name	Material	Process	Mass (kg)	End of life
1	Component 1	Aluminum alloys ▼	Casting ▼	2.3	Recycle ▼
4	Component 2	Polypropylene ▼	Polymer molding ▼	1.85	Landfill ▼
1	Component 3	Glass ▼	Glass molding ▼	3.7	Reuse ▼

Total embodied energy

Total process energy

Total mass

Total end of life energy

## Transport

Delivery to UK

Air freight ▼

12000 km

## Use

Electric power

2 kW ▼

55 days

2.5 hrs/day

Output: Bar charts, tables of energy and carbon.

# Transport

Transport stage

*Stage 1*

Transport type



Distance (km)

- Sea freight
- River / Canal freight
- Rail freight
- 32 tonne truck
- 14 tonne truck
- Light goods vehicle
- Air freight - short haul
- Air freight - long haul
- Helicopter (Eurocopter AS 35)

*Table of transport types:*  
*MJ / tonne.km*  
*CO<sub>2</sub> / tonne.km*

# Transport

Transport stage

*Stage 1*

*Stage 2*

Transport type

*32 tonne truck*

*Sea freight*

Distance (km)

*350*

*12000*

Transport energy

Transport CO<sub>2</sub>



# Use phase – static mode

## Static mode



Product uses the following energy:

Energy input and output

*Fossil fuel to electric*

Power rating

Usage

days per year

Usage

hours per day

### Energy conversion path

Fossil fuel to heat, enclosed system

Fossil fuel to heat, vented system

Fossil fuel to electric

Fossil fuel to mechanical

Electric to heat

Electric to mechanical (electric motor)

Electric to chemical (lead-acid battery)

Electric to chemical (Lithium-ion battery)

Electric to light (incandescent lamp)

Electric to light (LED)

*Table of energy  
conversion  
efficiencies*

# Use phase – static mode

## Static mode

☒ Product uses the following energy:

Energy input and output

*Fossil fuel to electric*

Power rating

*1.2*

*kW*

Usage

*365*

Usage

*0.5*

W

**kW**

MW

hp

ft.lb/sec

kCal/yr

BTU/yr

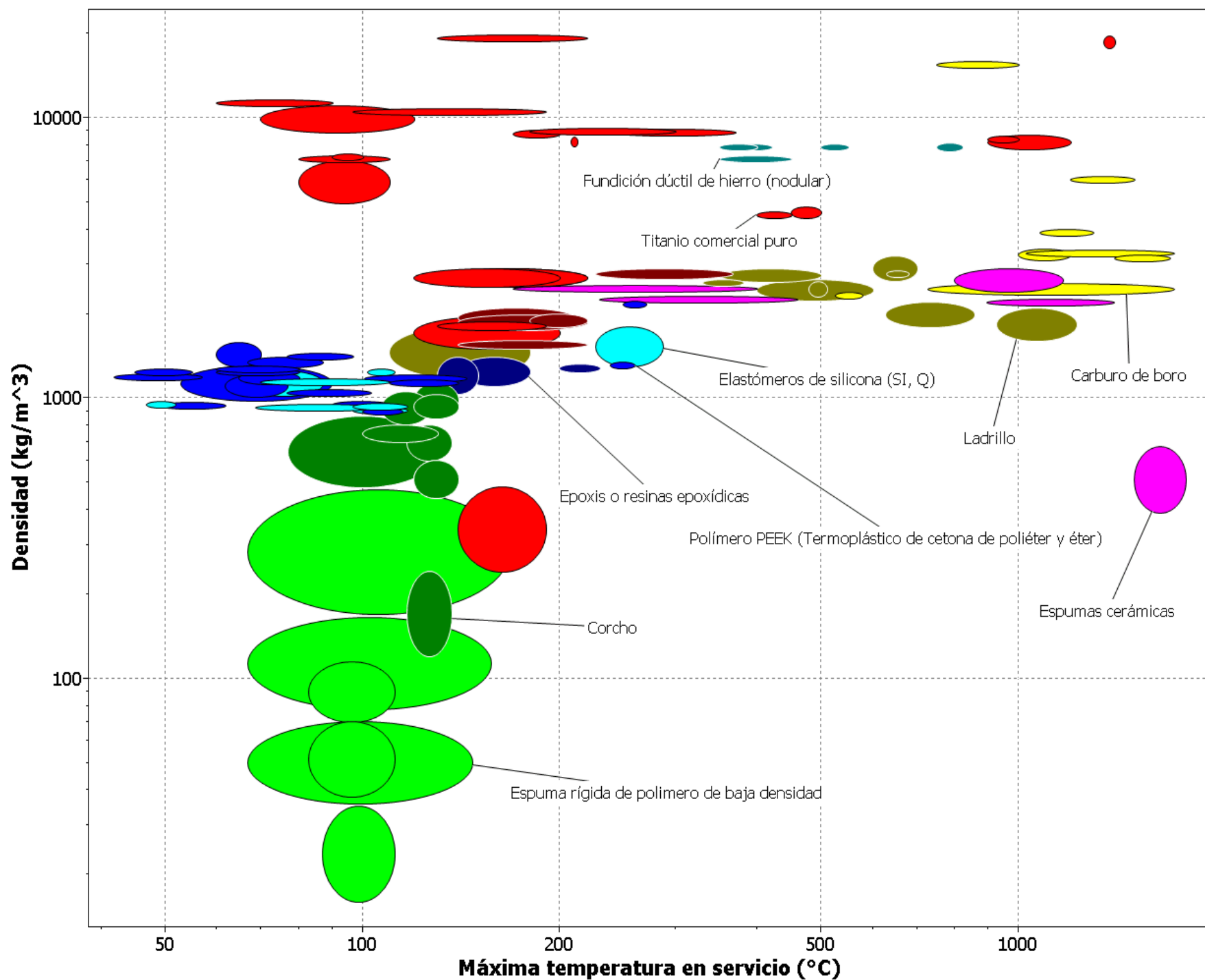
Total energy and CO<sub>2</sub> for use

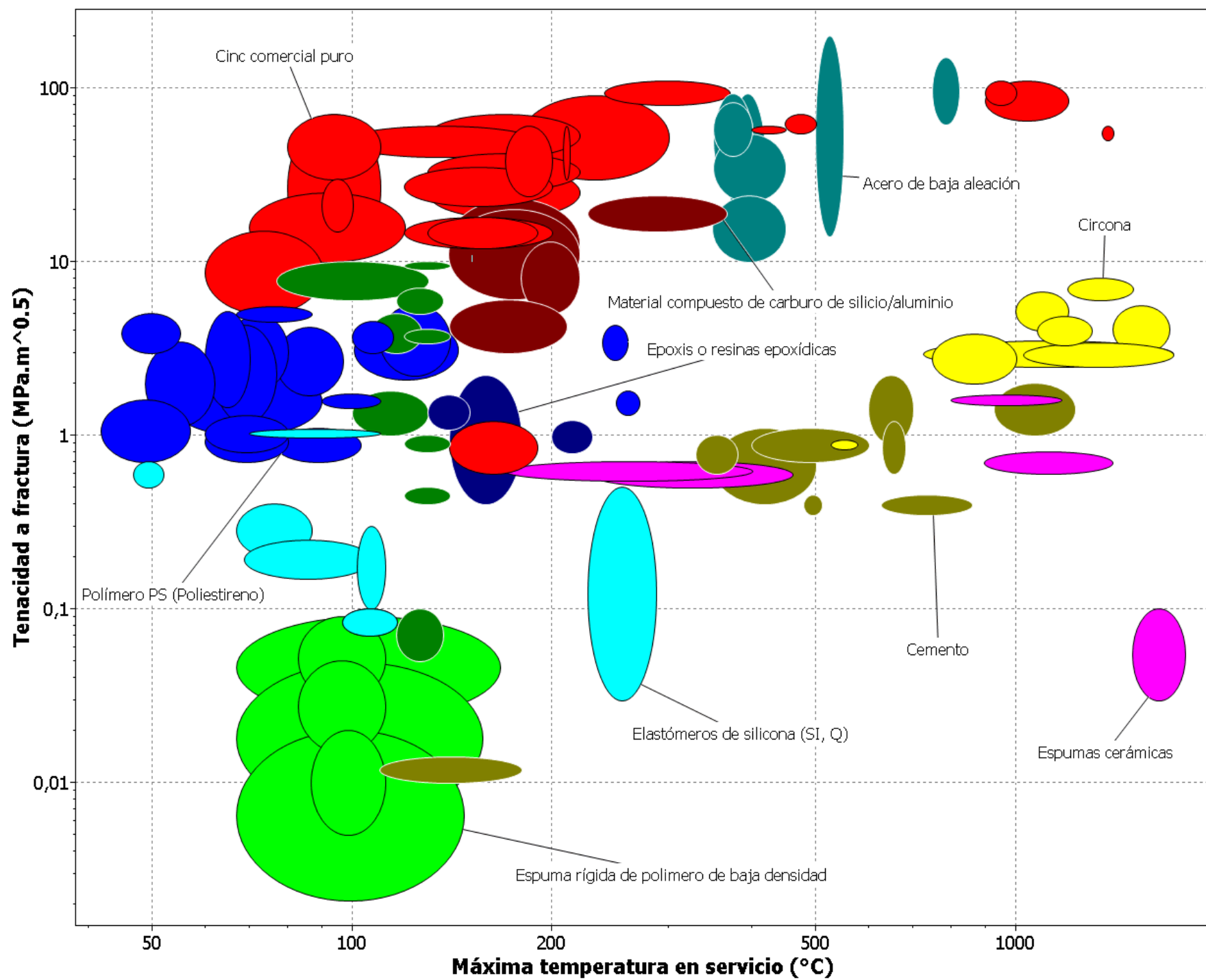
## Comparativa de propiedades de materiales mediante Gráficos de Ashby

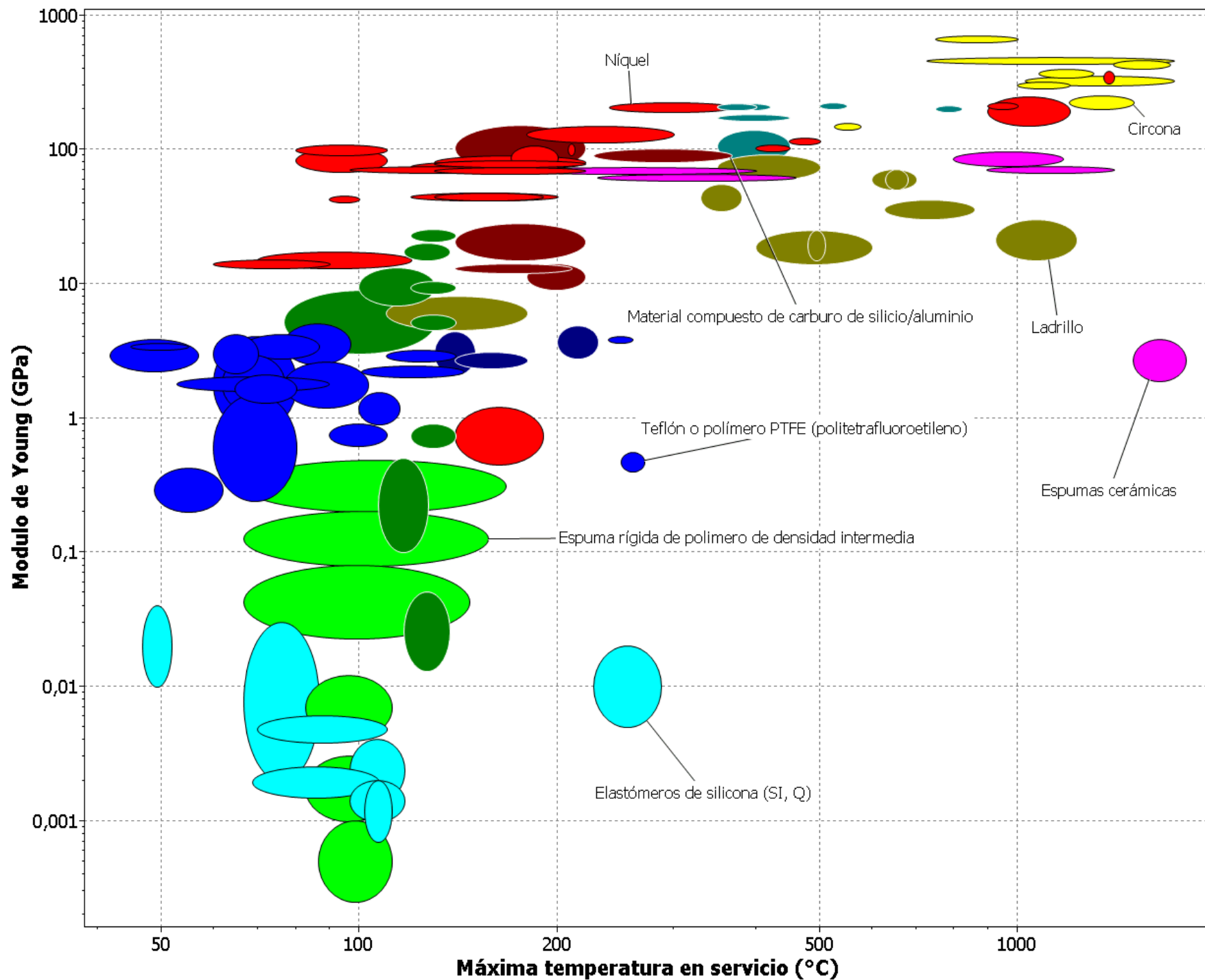
Para los siguientes gráficos se han seleccionado dos propiedades («Temperatura máxima de trabajo» y «Módulo de Young») para compararlas con los siguientes grupos de propiedades y atributos:

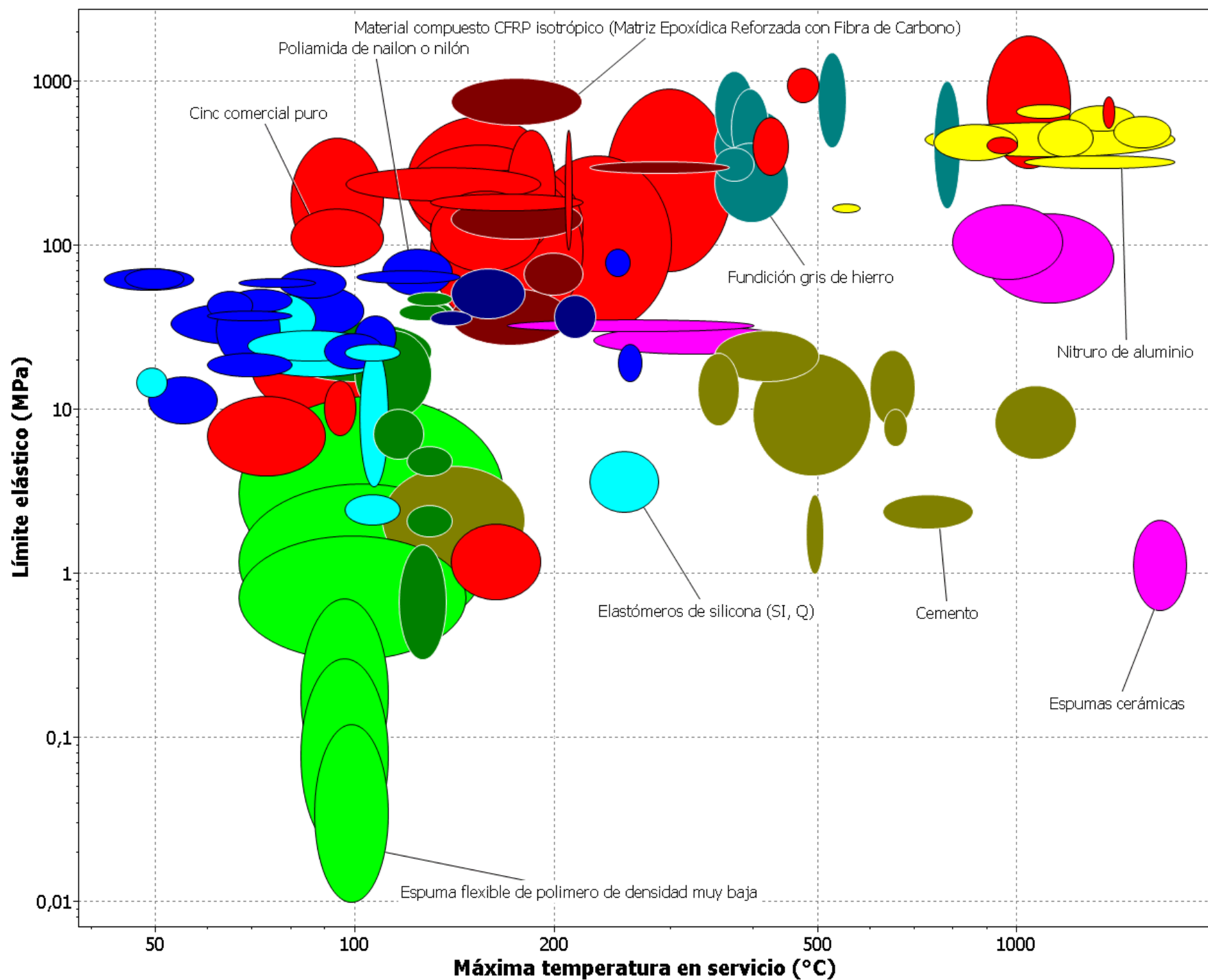
1. Mecánicas
2. Térmicas
3. Precio
4. Medio ambiente
5. Procesado
6. Resistencia a la corrosión

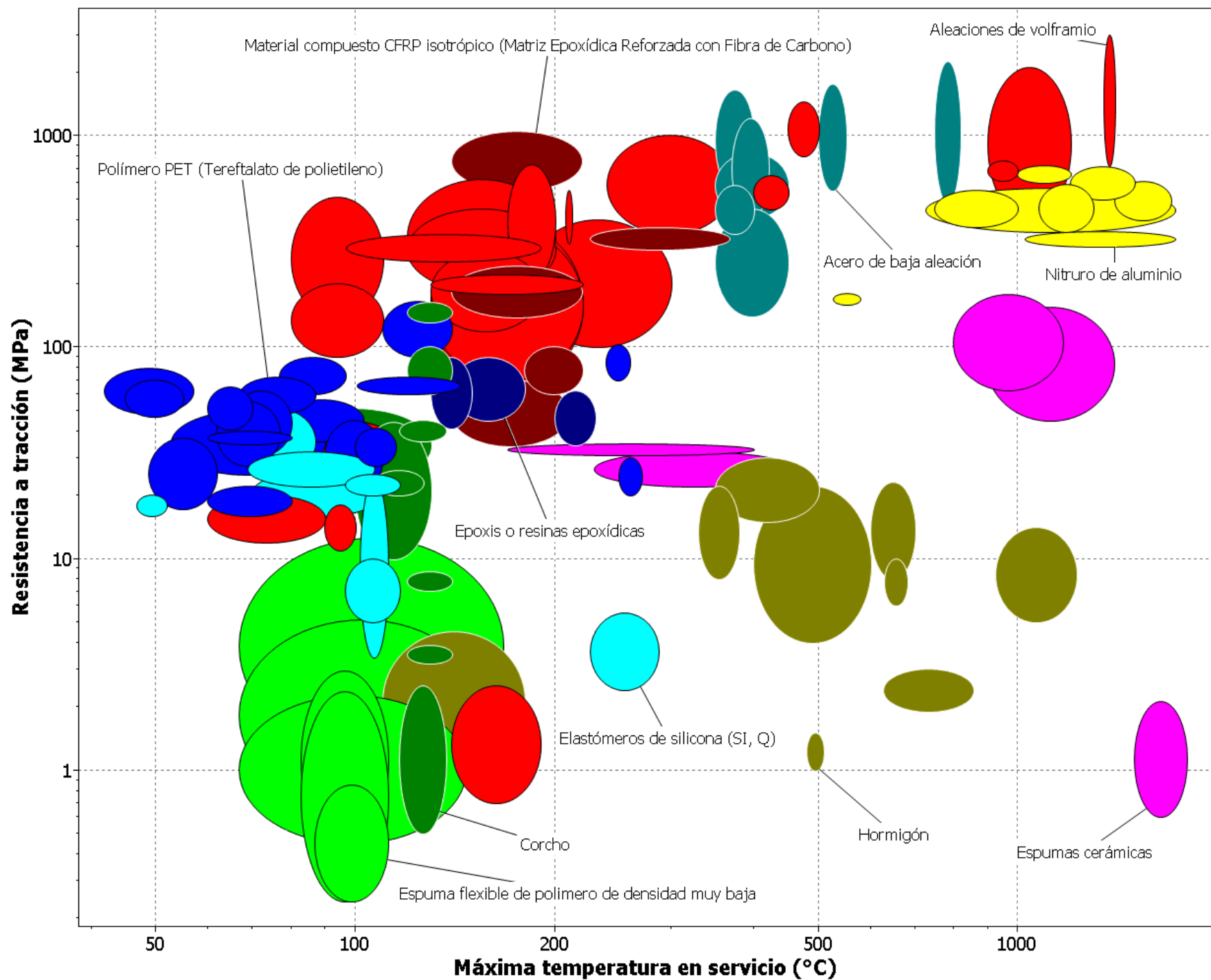
Cada color representa una familia de materiales y al menos uno de cada familia está nombrado en todos los gráficos.













Resistencia a fatiga para  $10^7$  ciclos (MPa)

Madera dura: roble, respuesta en dirección paralela a las vetas

Material compuesto de carburo de silicio/aluminio

Acero inoxidable

Titanio comercial puro

Vidrio de sílice

Carburo de silicio

Material compuesto de carburo de silicio/aluminio

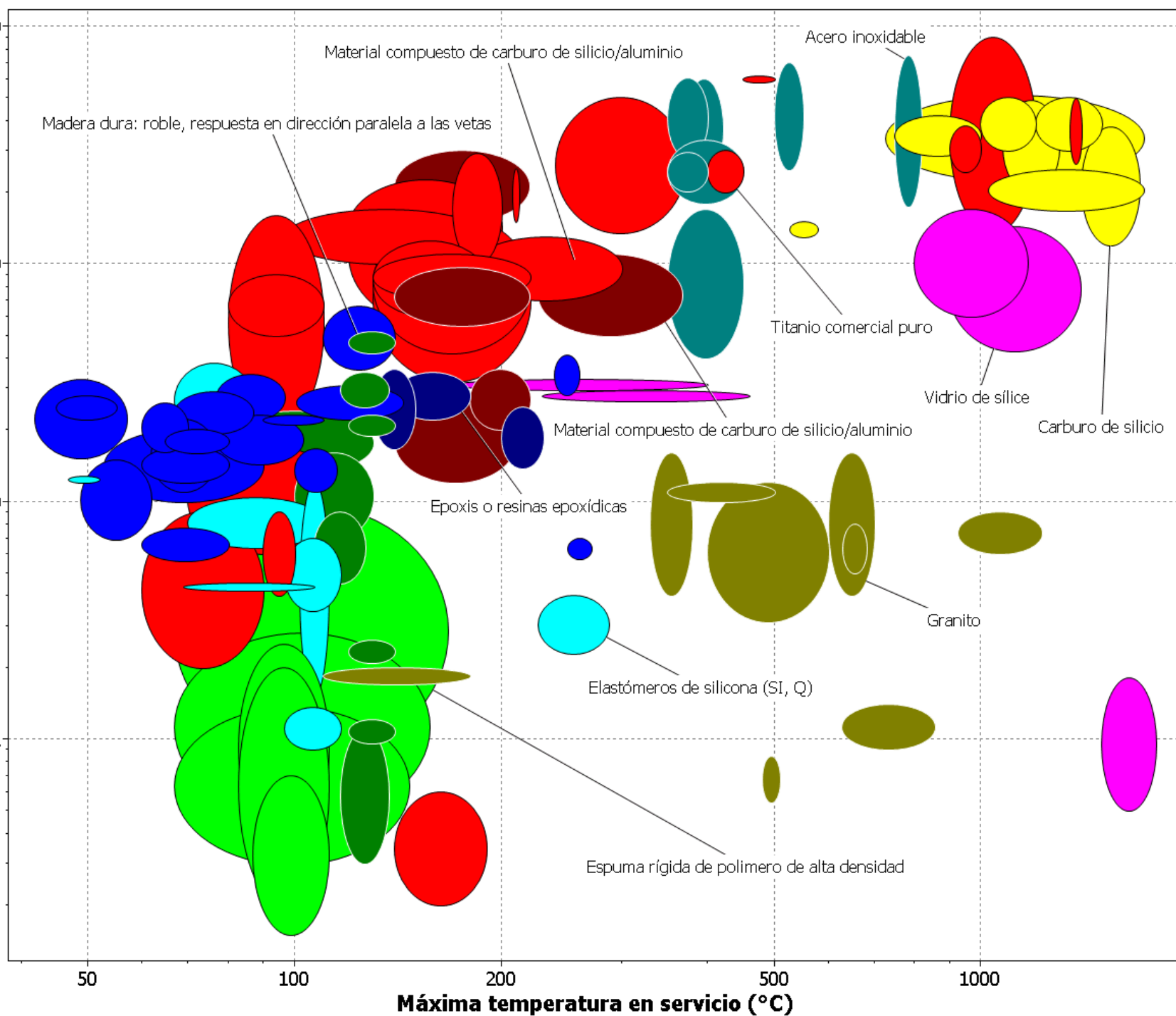
Epoxis o resinas epoxídicas

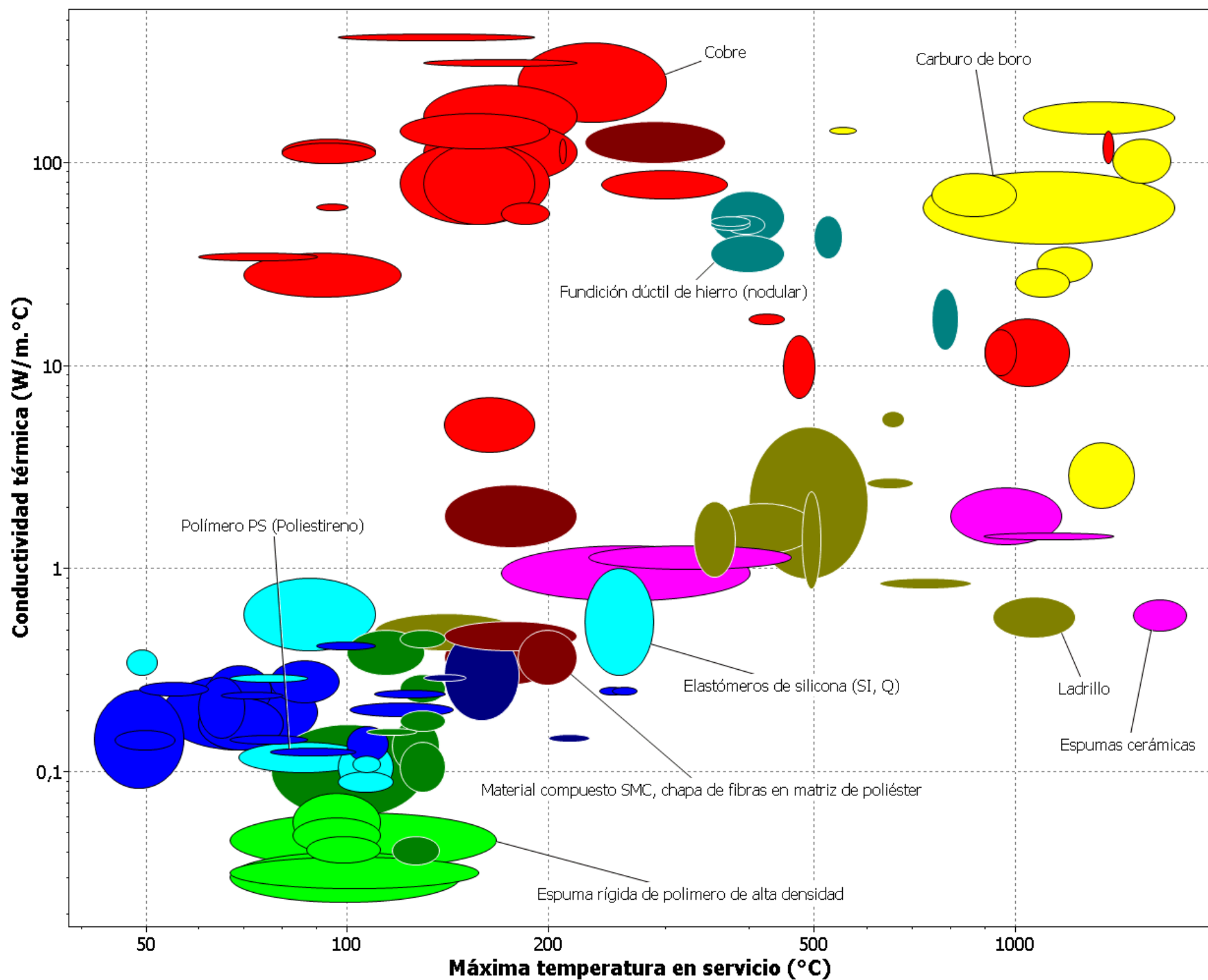
Granito

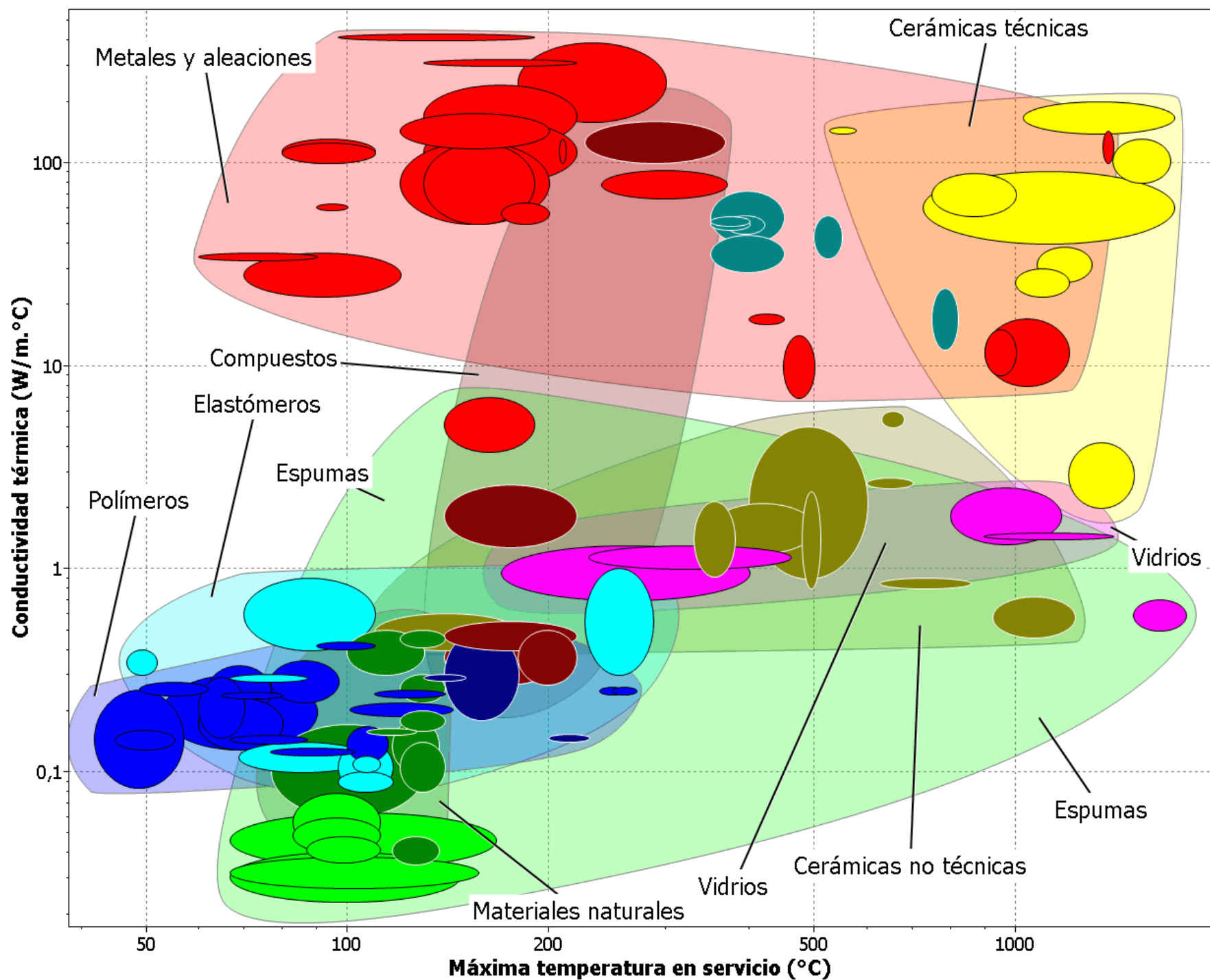
Elastómeros de silicona (SI, Q)

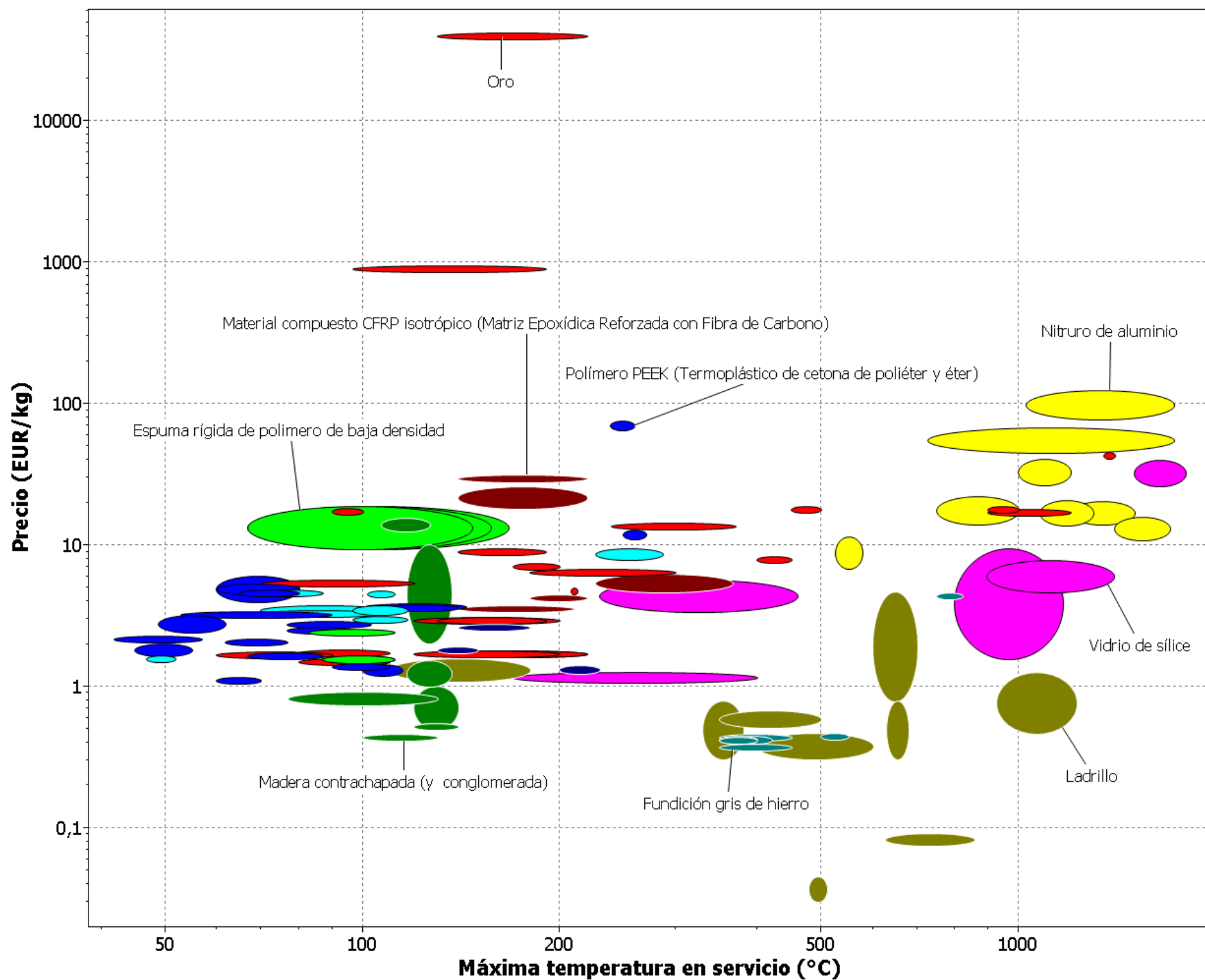
Espuma rígida de polímero de alta densidad

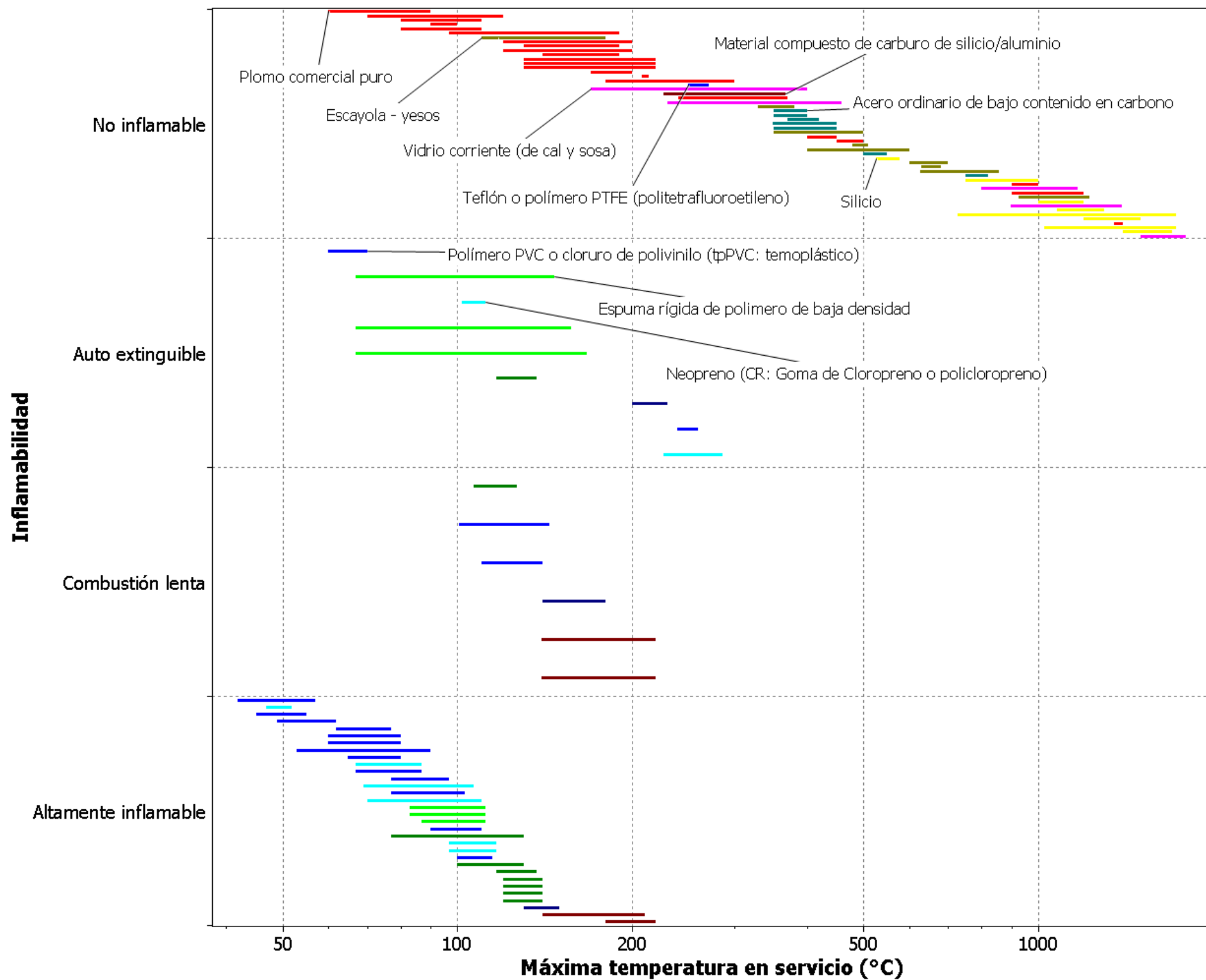
Máxima temperatura en servicio ( $^{\circ}\text{C}$ )











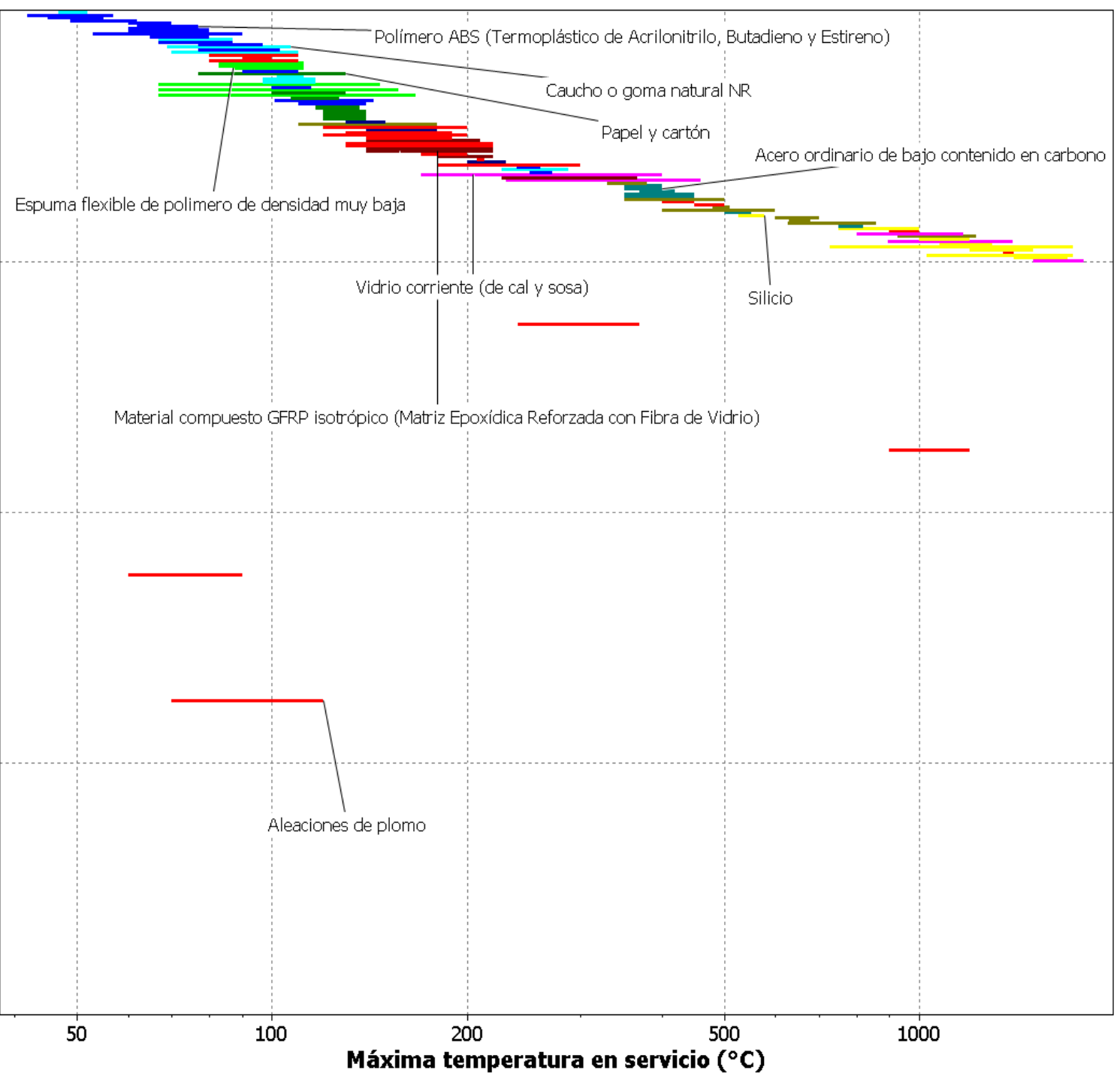
**Ratio de toxicidad**

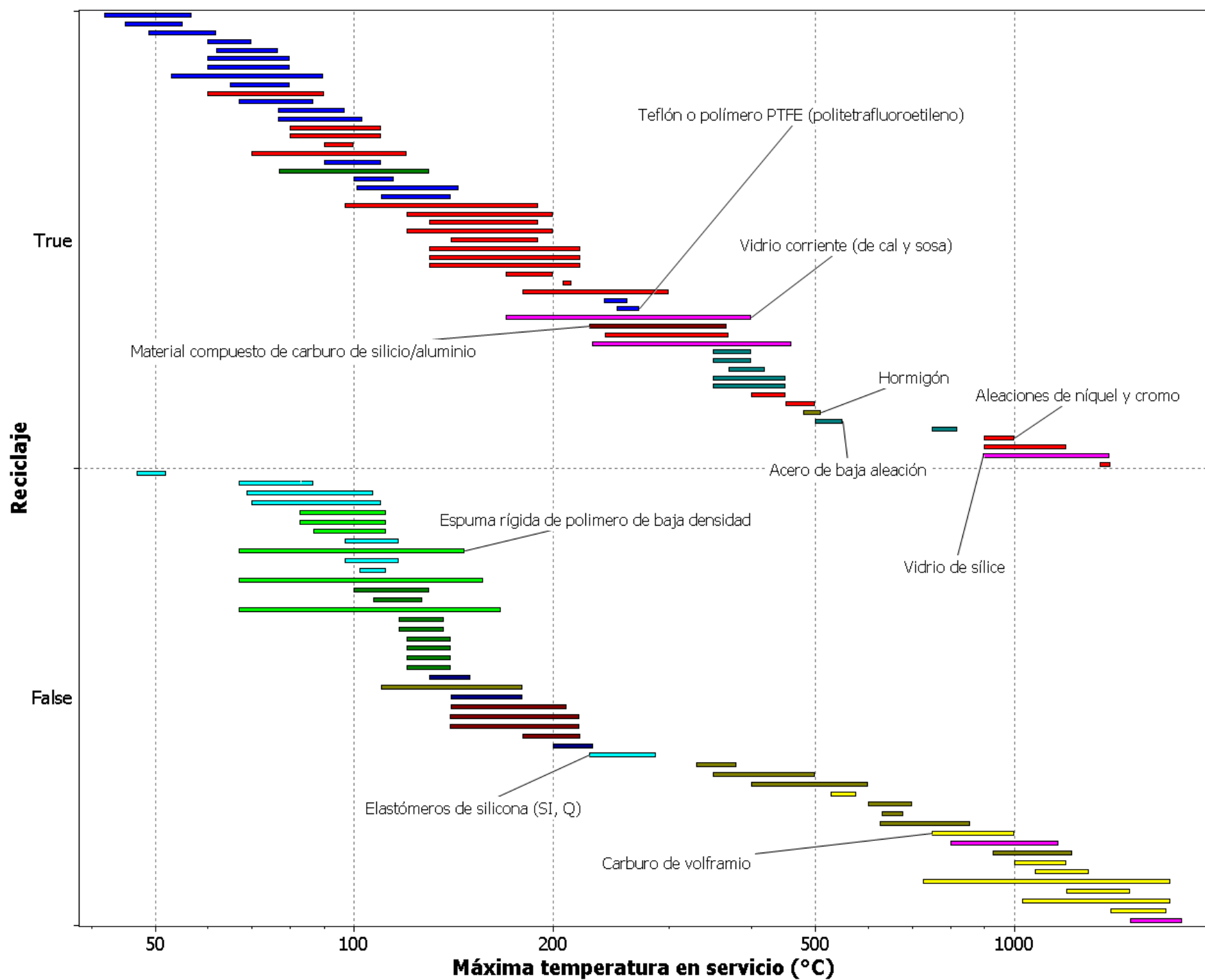
No toxico

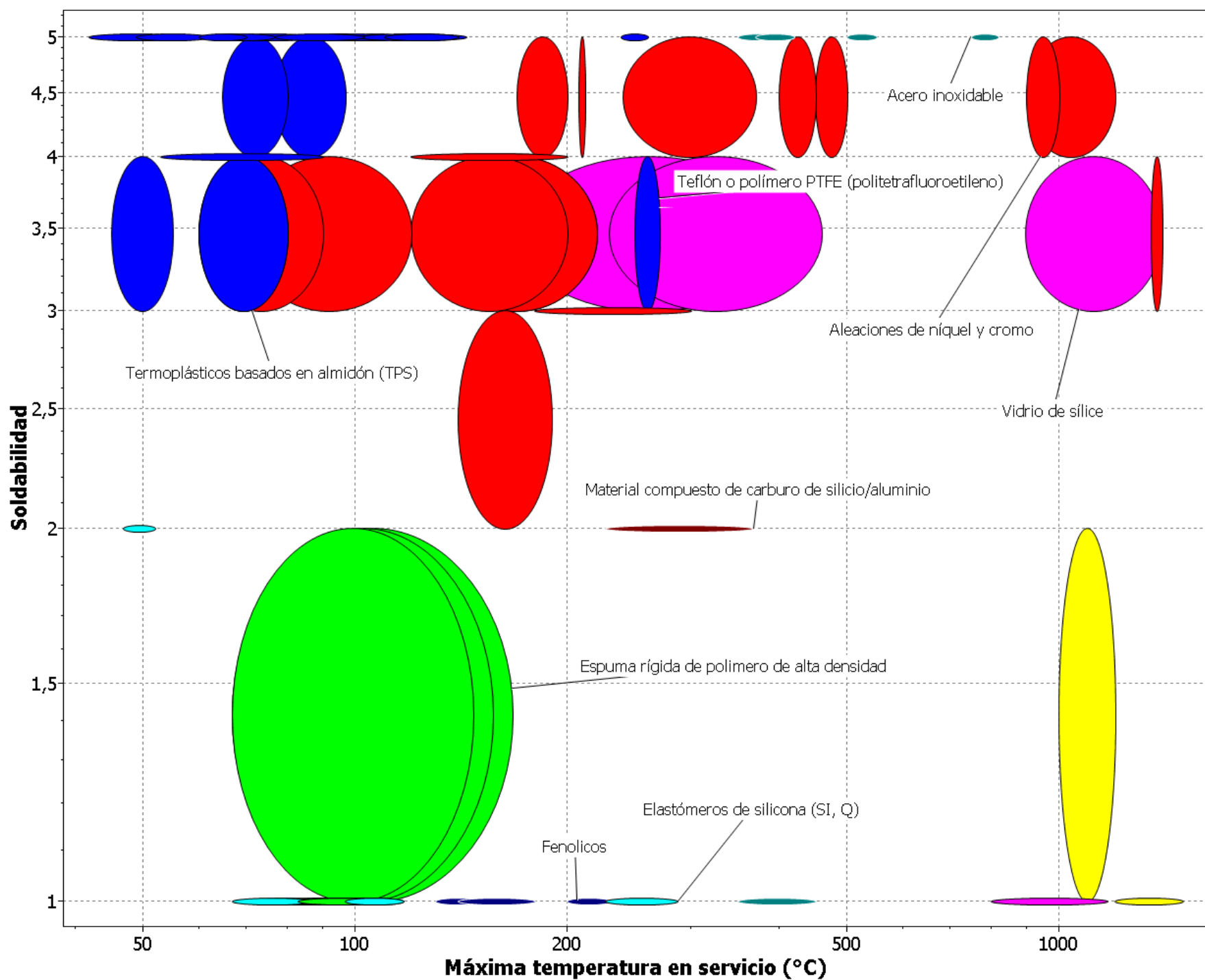
Ligeramente toxico

Toxico

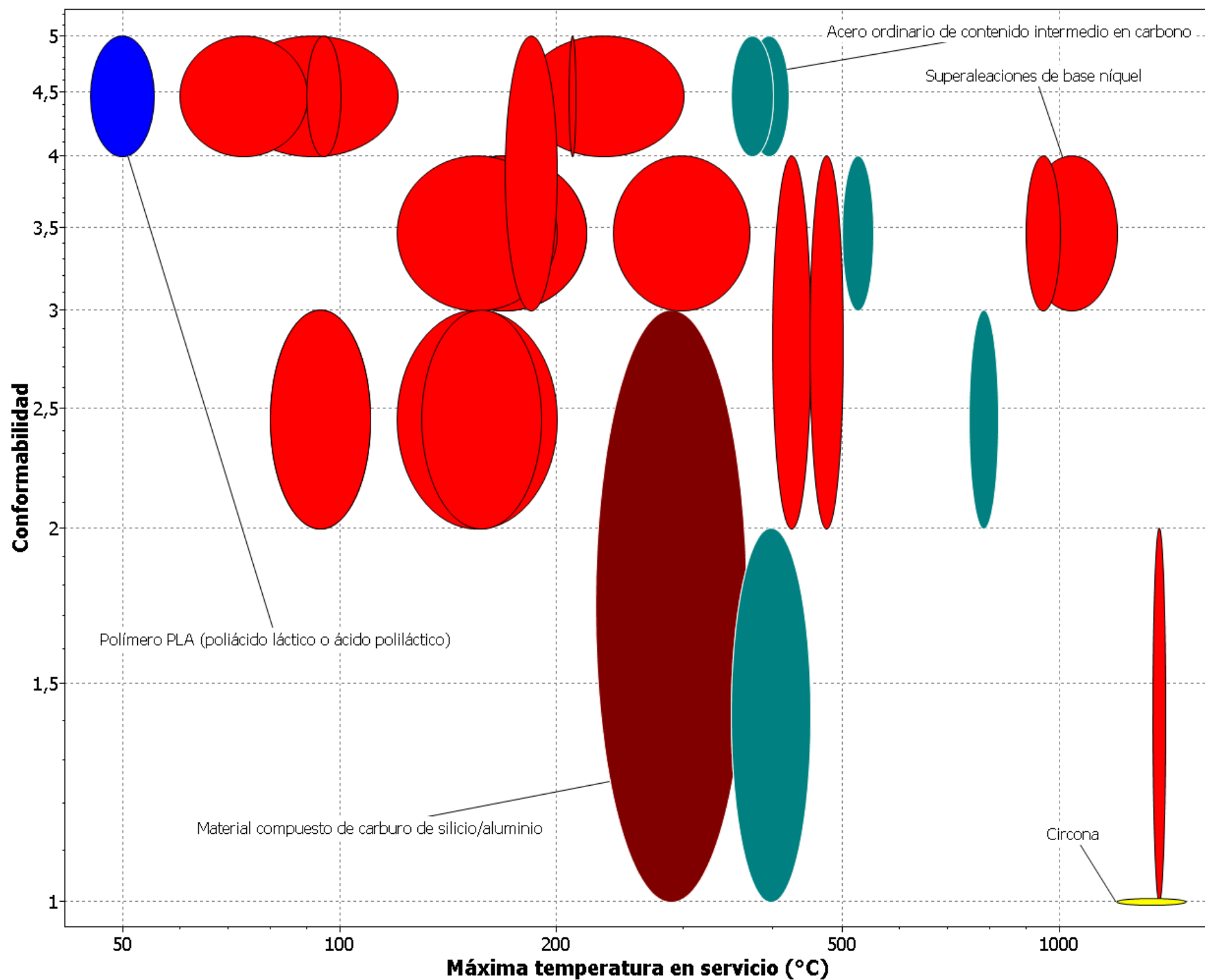
Muy toxico

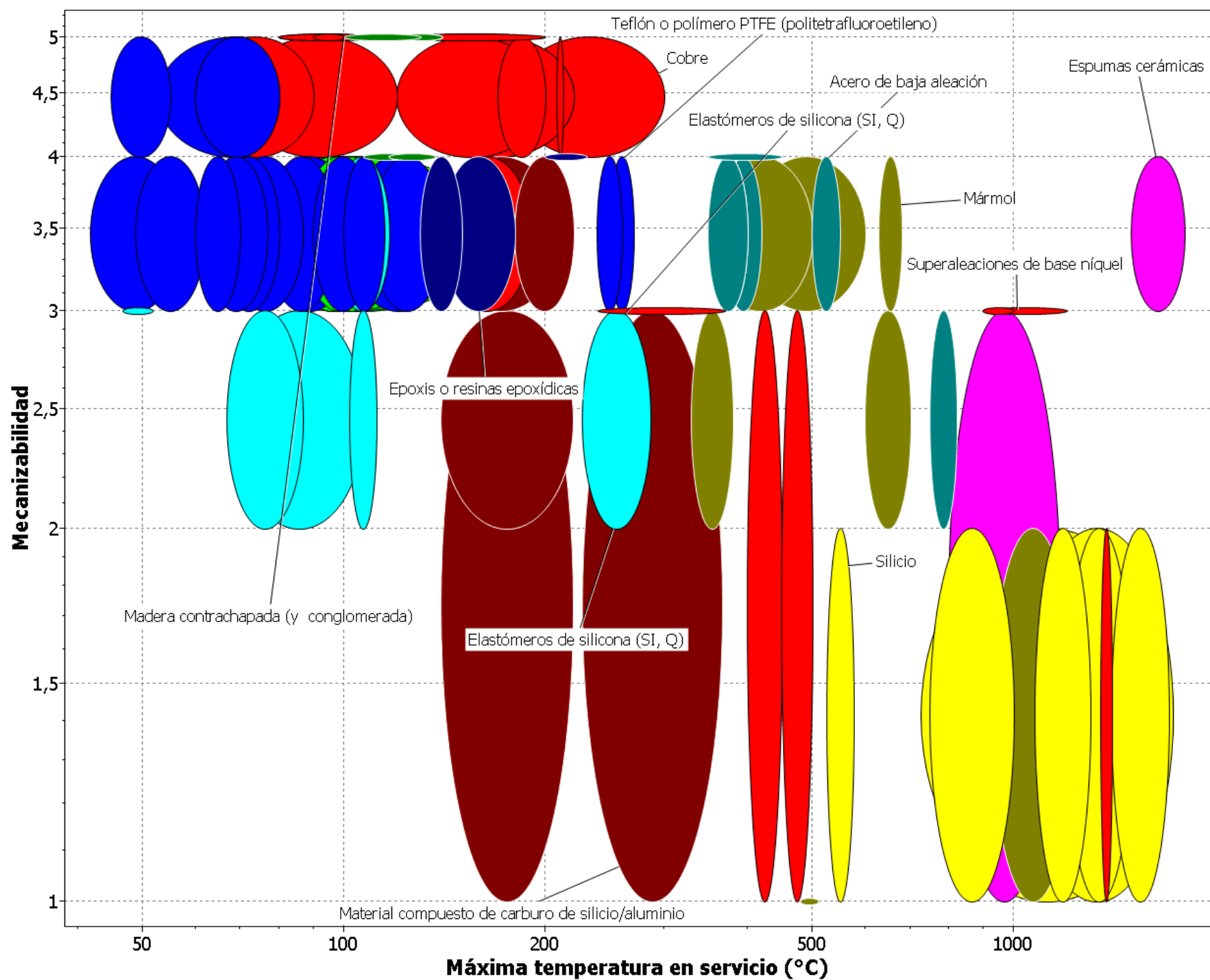


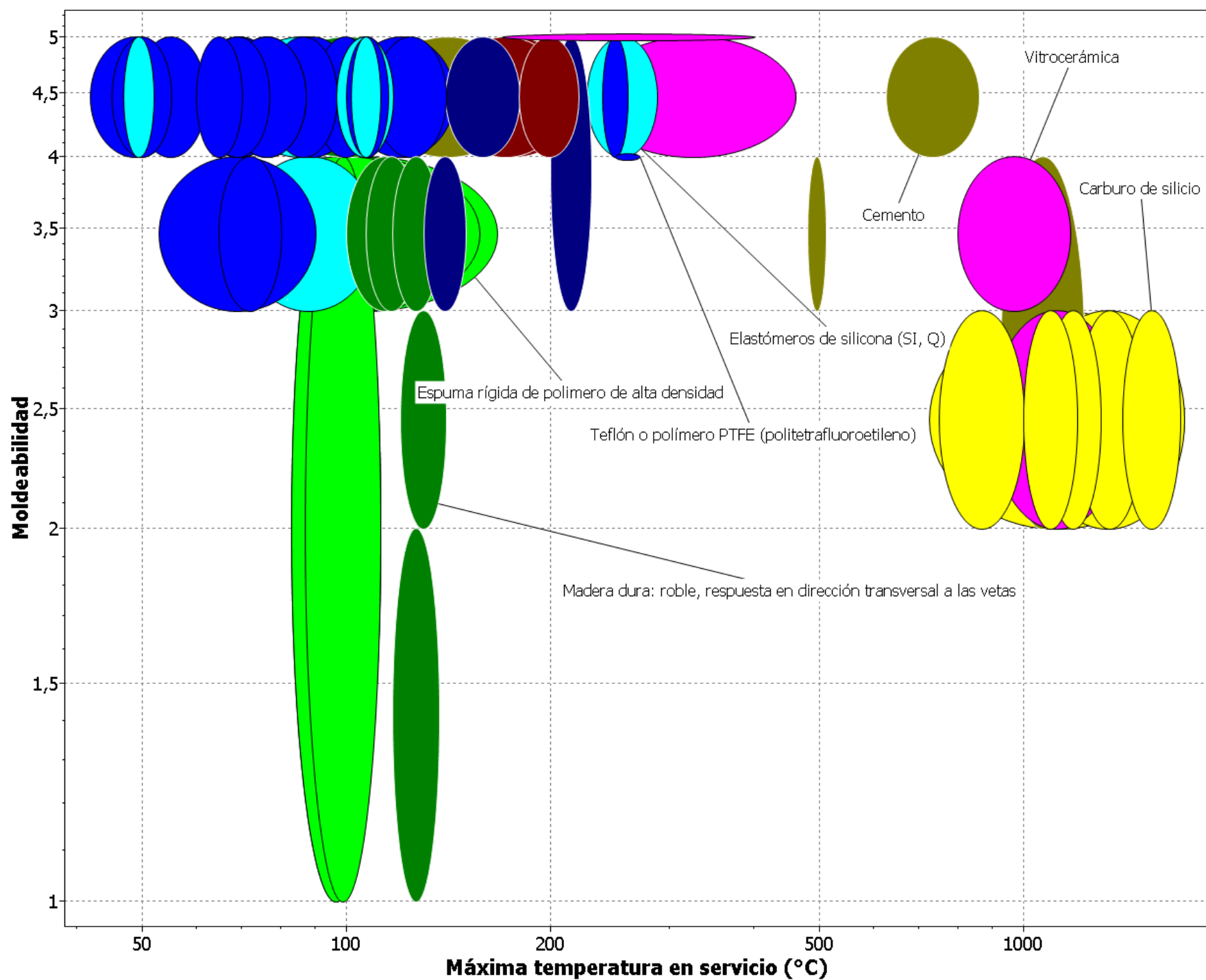


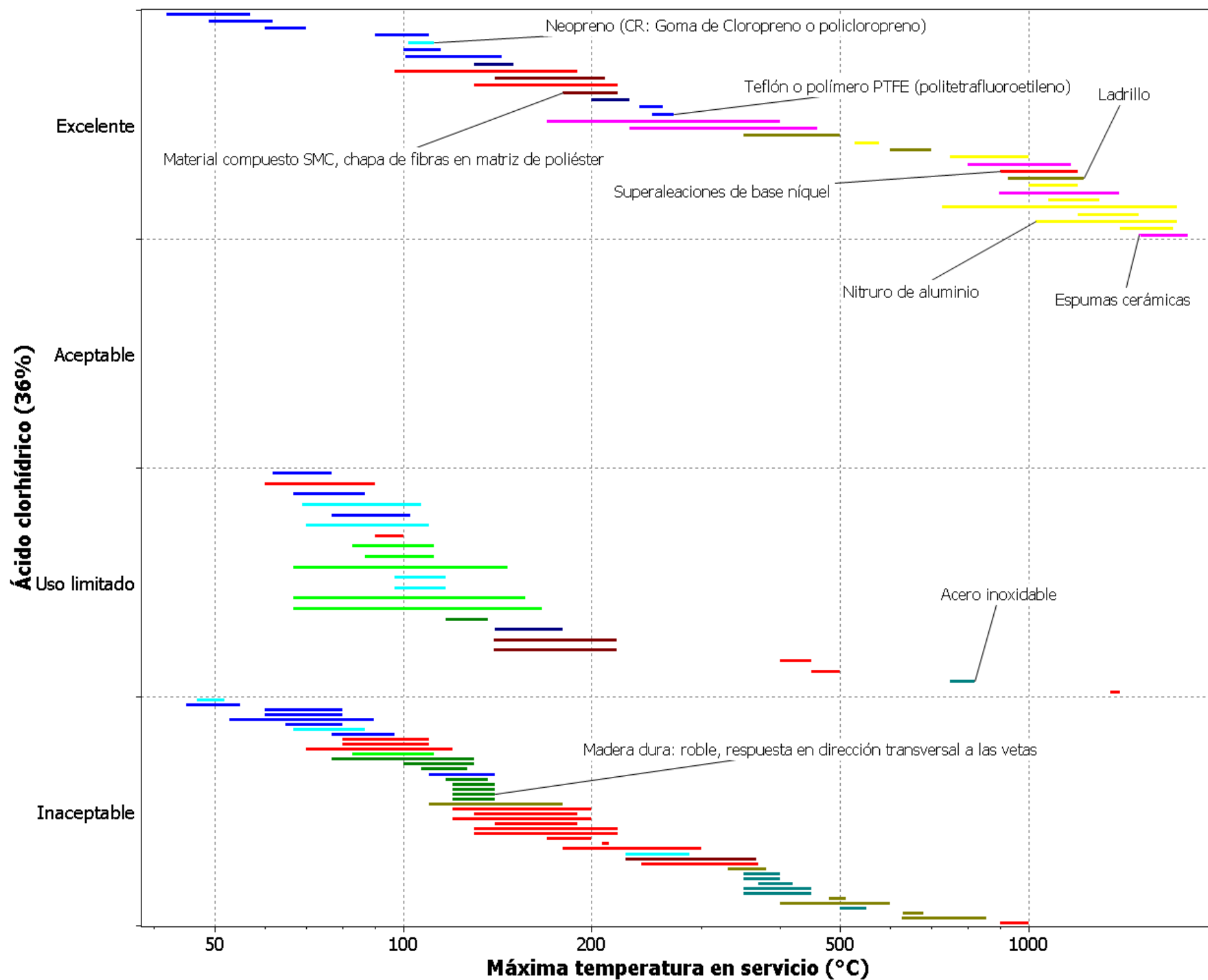


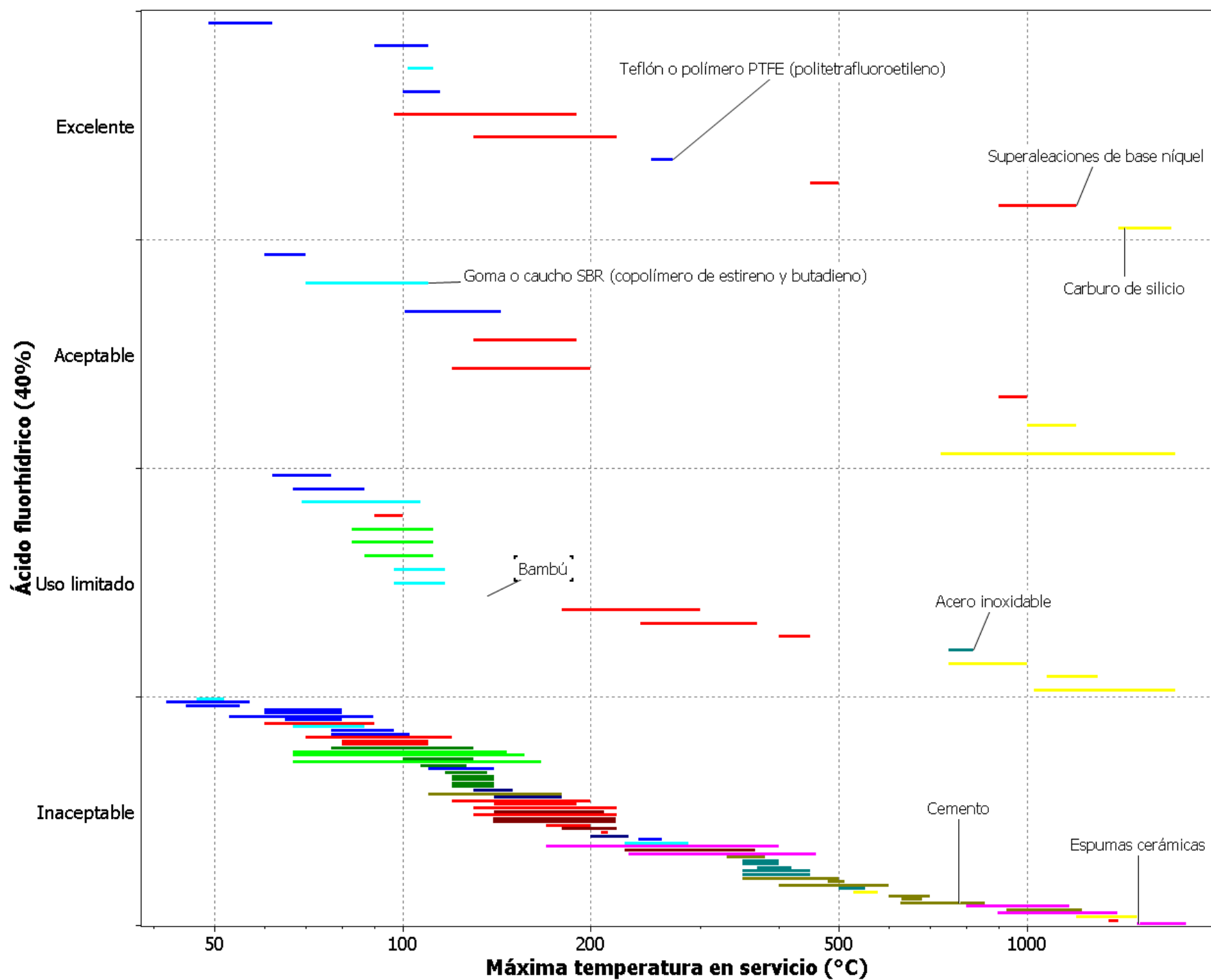










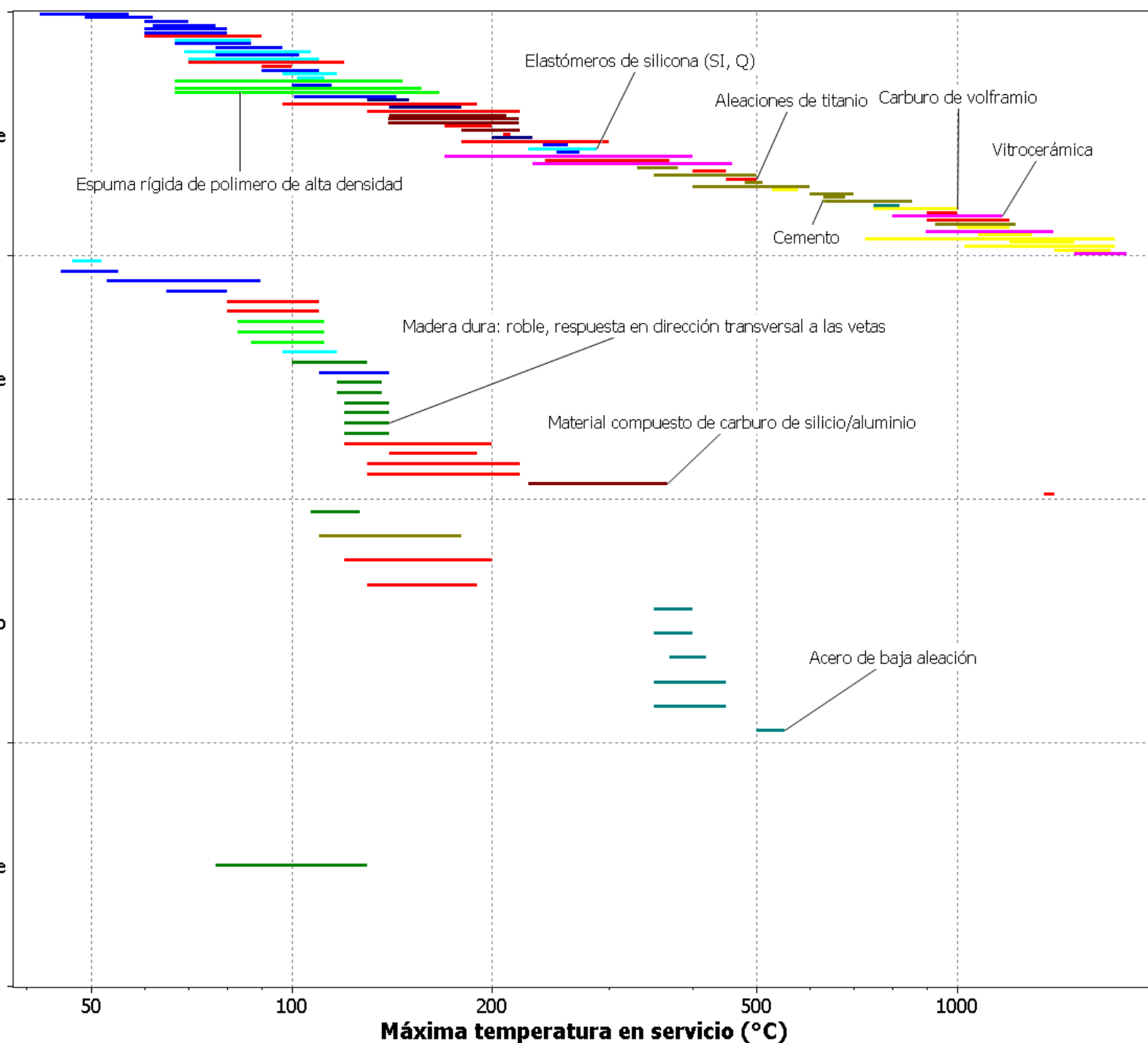


Excelente

Aceptable

Uso limitado

Inaceptable



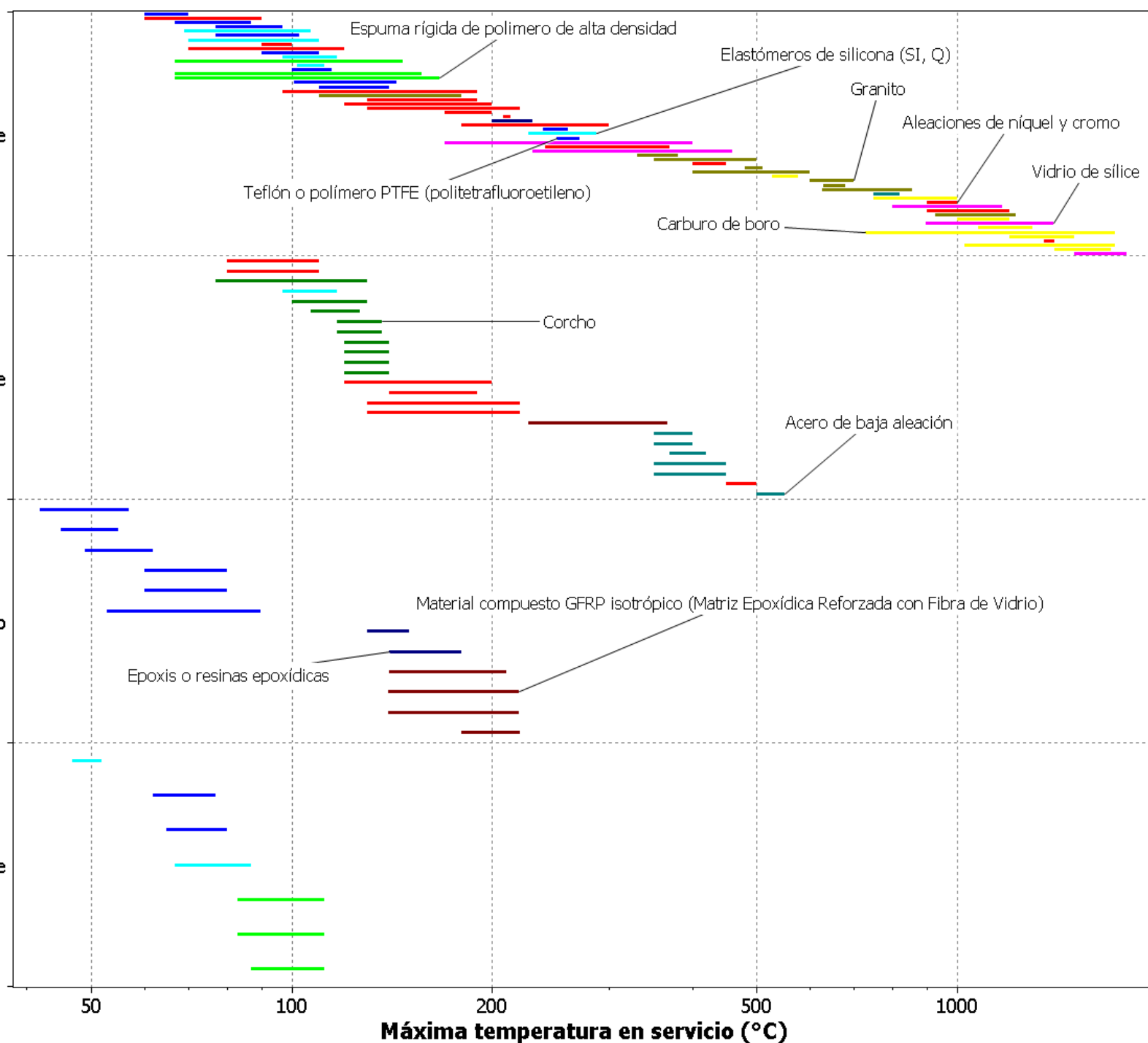
Etanol

Excelente

Aceptable

Uso limitado

Inaceptable



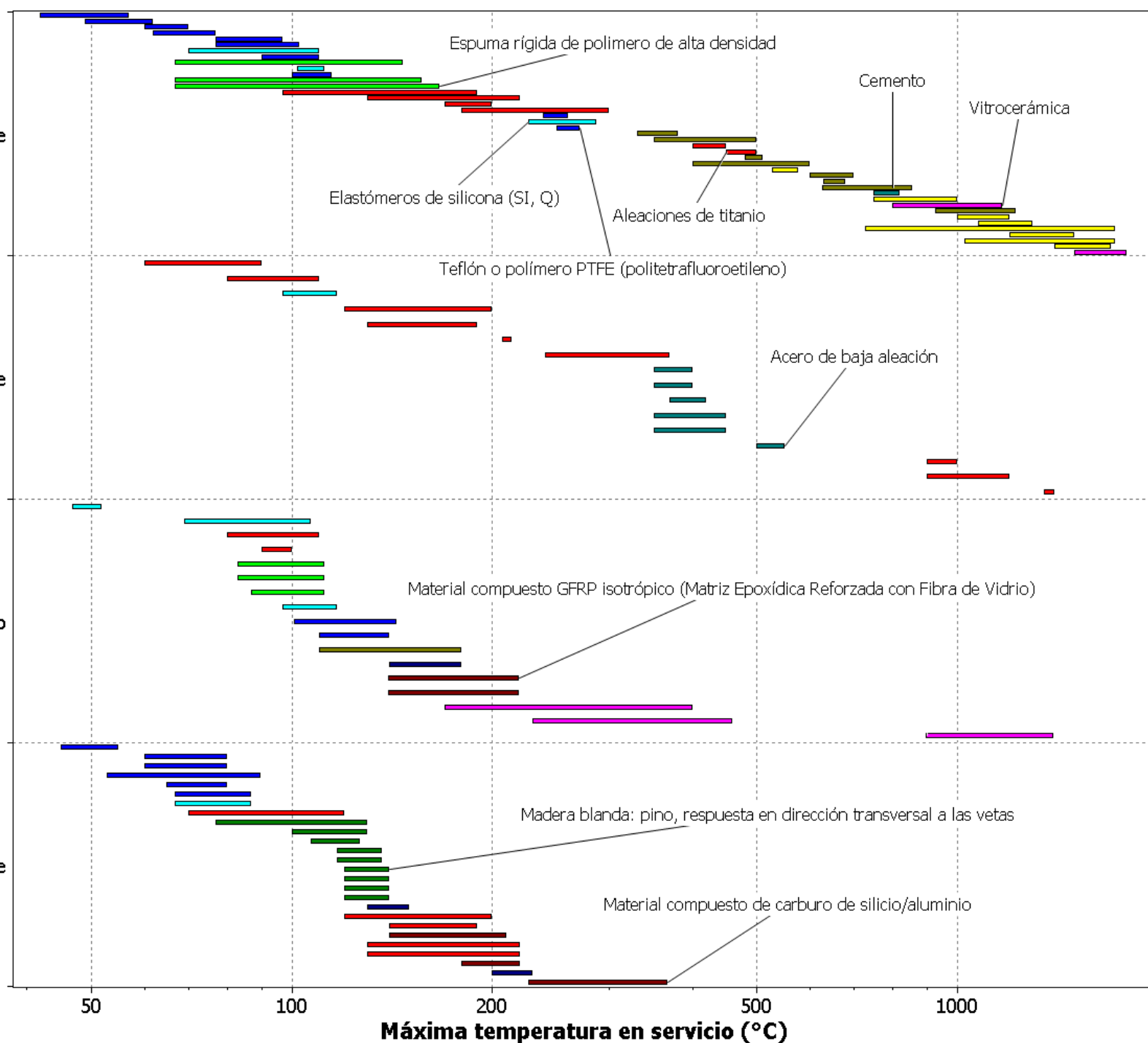
Hidróxido de sodio (60%)

Excelente

Aceptable

Uso limitado

Inaceptable





Densidad (kg/m<sup>3</sup>)

10000

1000

100

0,001

0,01

0,1

1

10

100

Modulo de Young (GPa)

Material compuesto CFRP isotrópico (Matriz Epoxídica Reforzada con Fibra de Carbono)

Polímero PP (Polipropileno)

Poliuretano elastomérico o polímero eIPU

Espumas cerámicas

Escayola - yesos

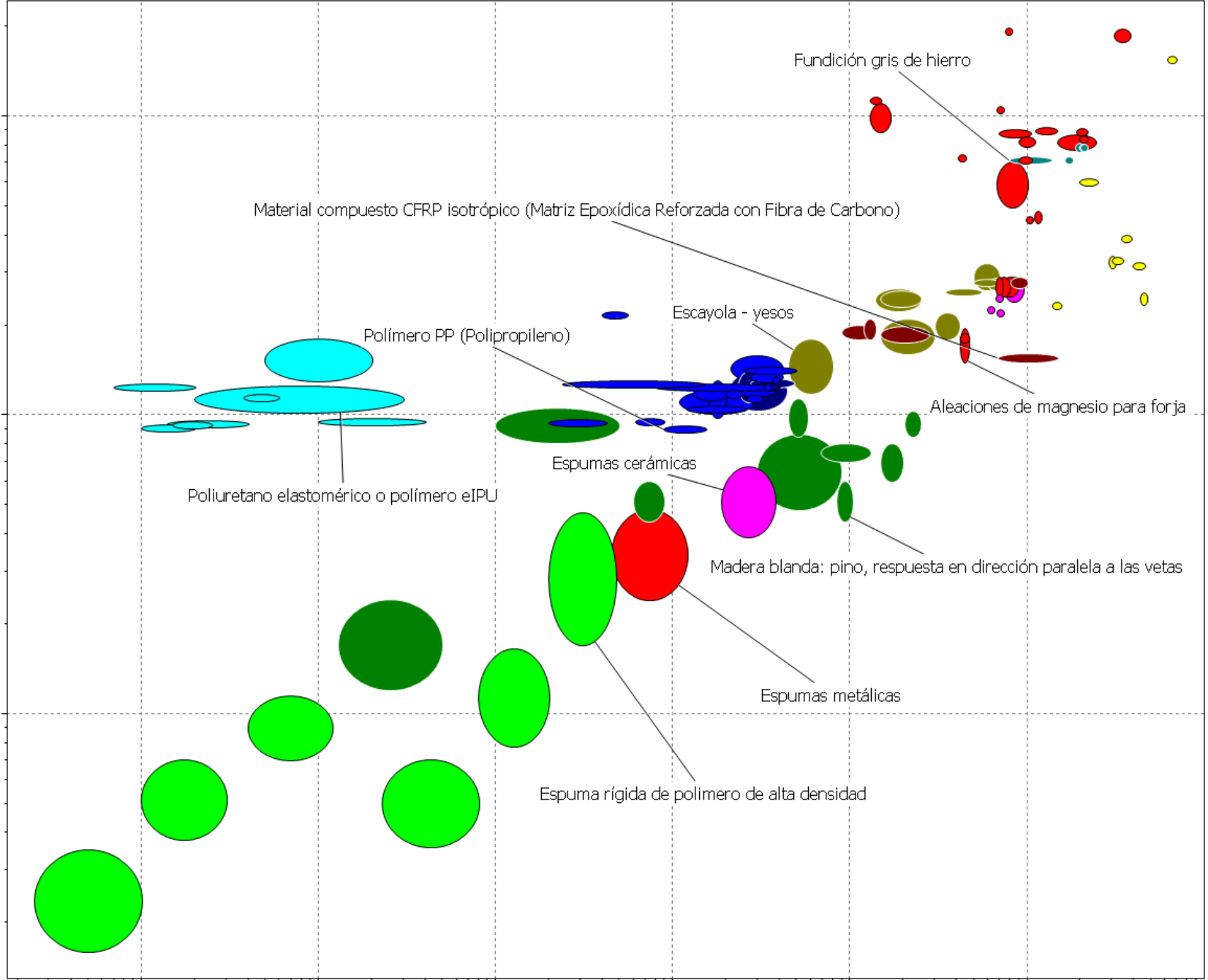
Aleaciones de magnesio para forja

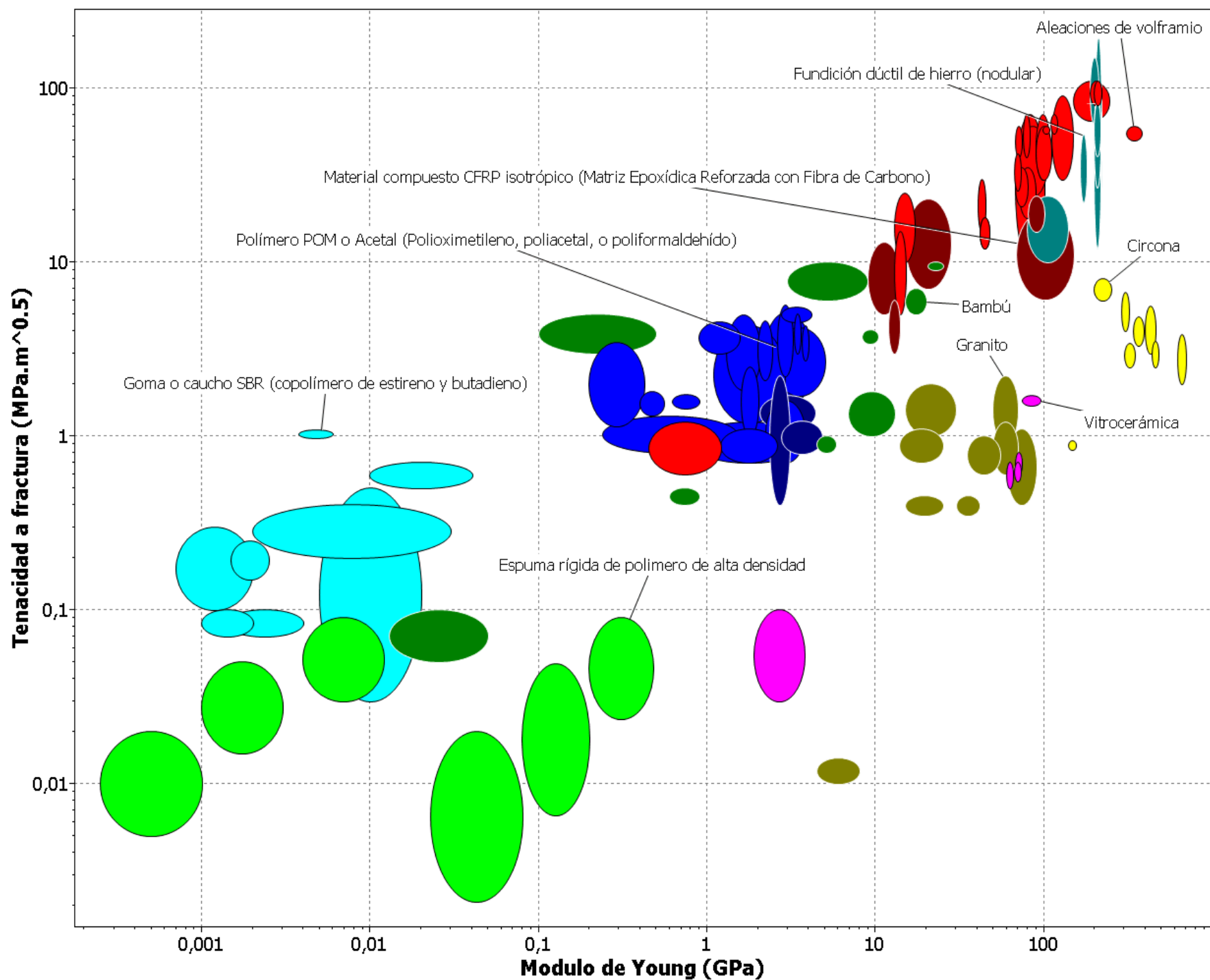
Fundición gris de hierro

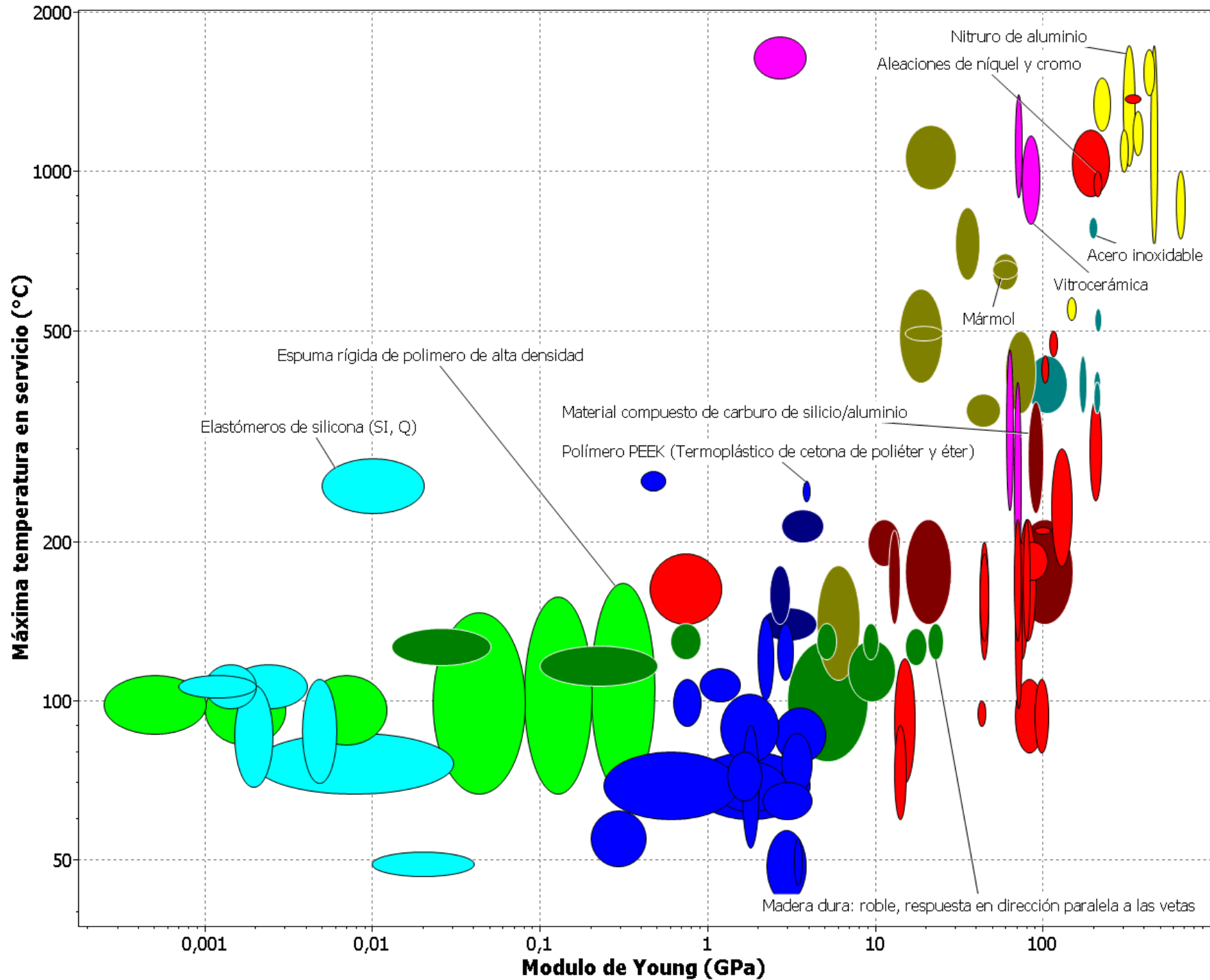
Madera blanda: pino, respuesta en dirección paralela a las vetas

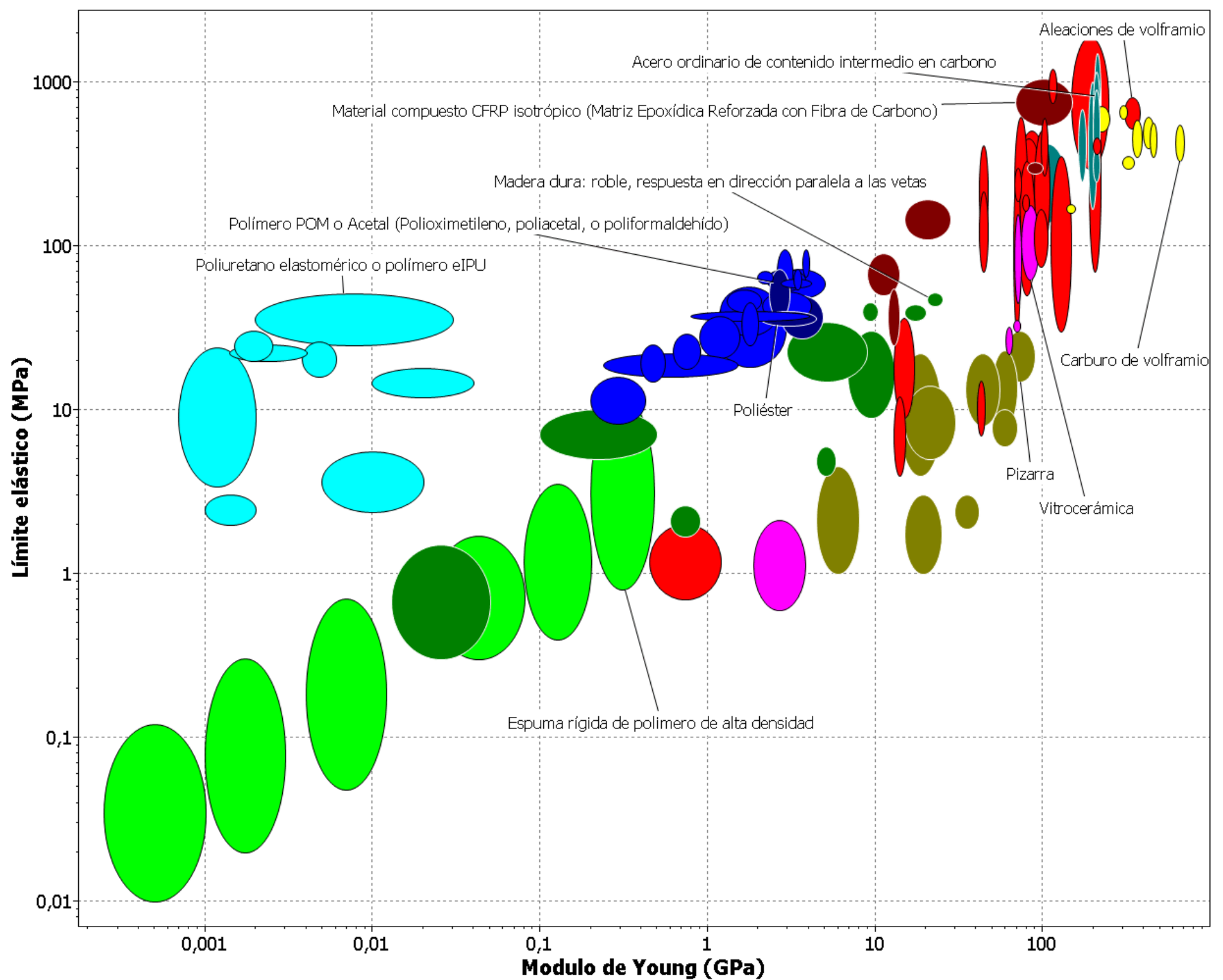
Espumas metálicas

Espuma rígida de polímero de alta densidad









Resistencia a tracción (MPa)

1000

100

10

1

0,001

0,01

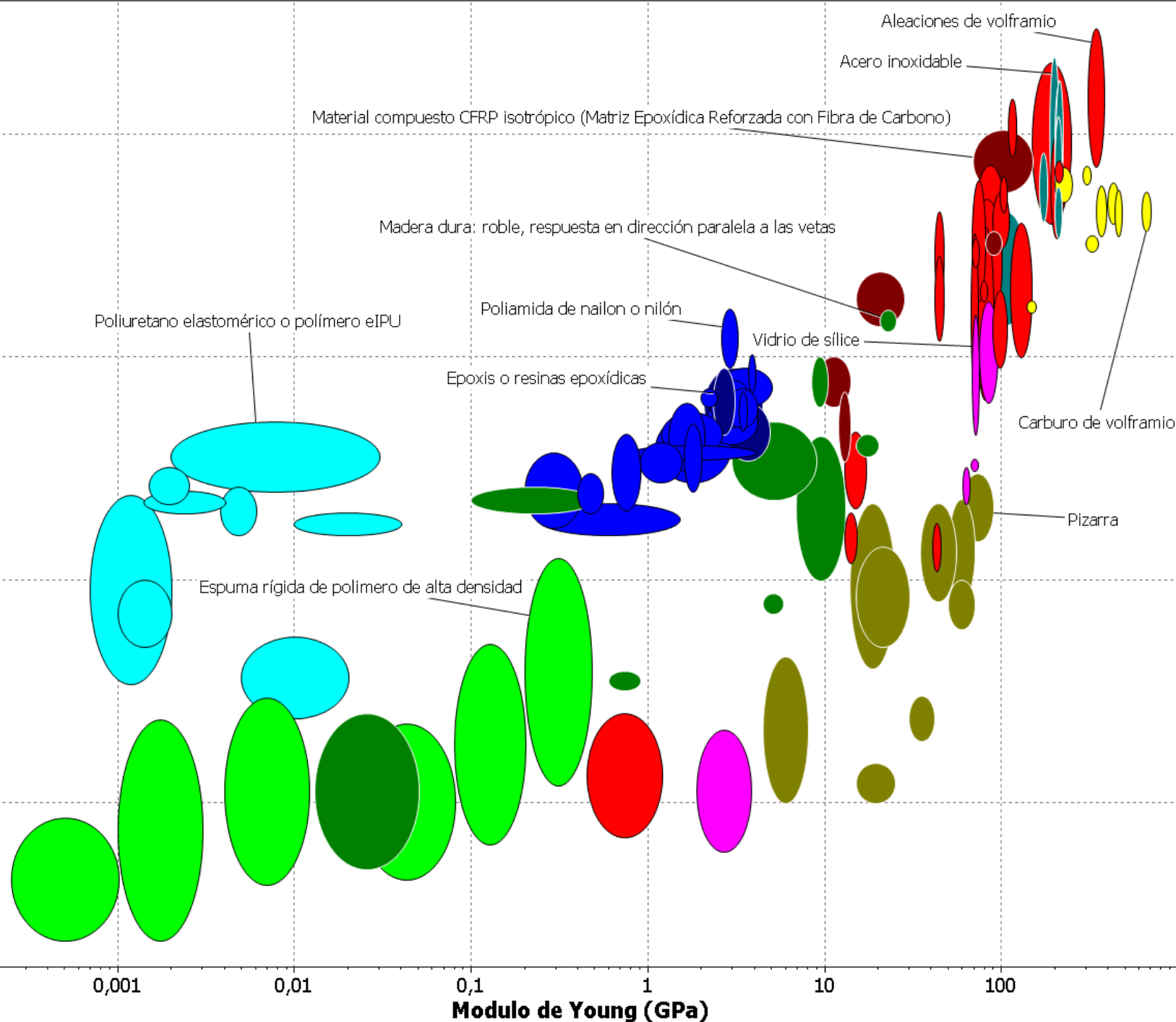
0,1

1

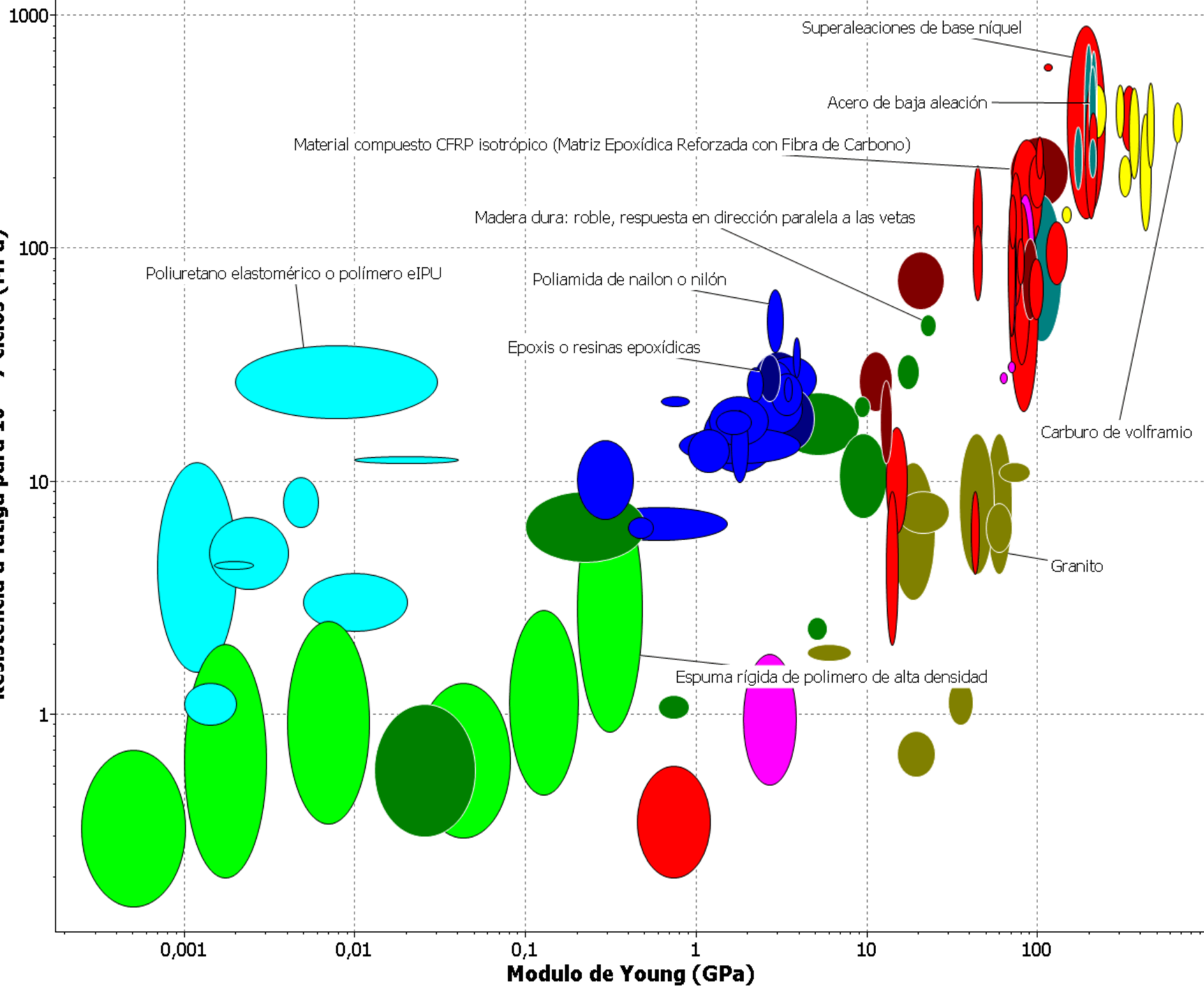
10

100

Modulo de Young (GPa)



Resistencia a fatiga para  $10^7$  ciclos (MPa)



Conductividad térmica (W/m.°C)

100

10

1

0,1

0,001

0,01

0,1

1

10

100

Modulo de Young (GPa)

Material compuesto GFRP isotrópico (Matriz Epoxídica Reforzada con Fibra de Vidrio)

Poliuretano elastomérico o polímero eIPU

Espuma rígida de polímero de alta densidad

Polímero PMMA o Acrílico (Polimetacrilato, o metacrilato de polimetilo)

Aleaciones de titanio

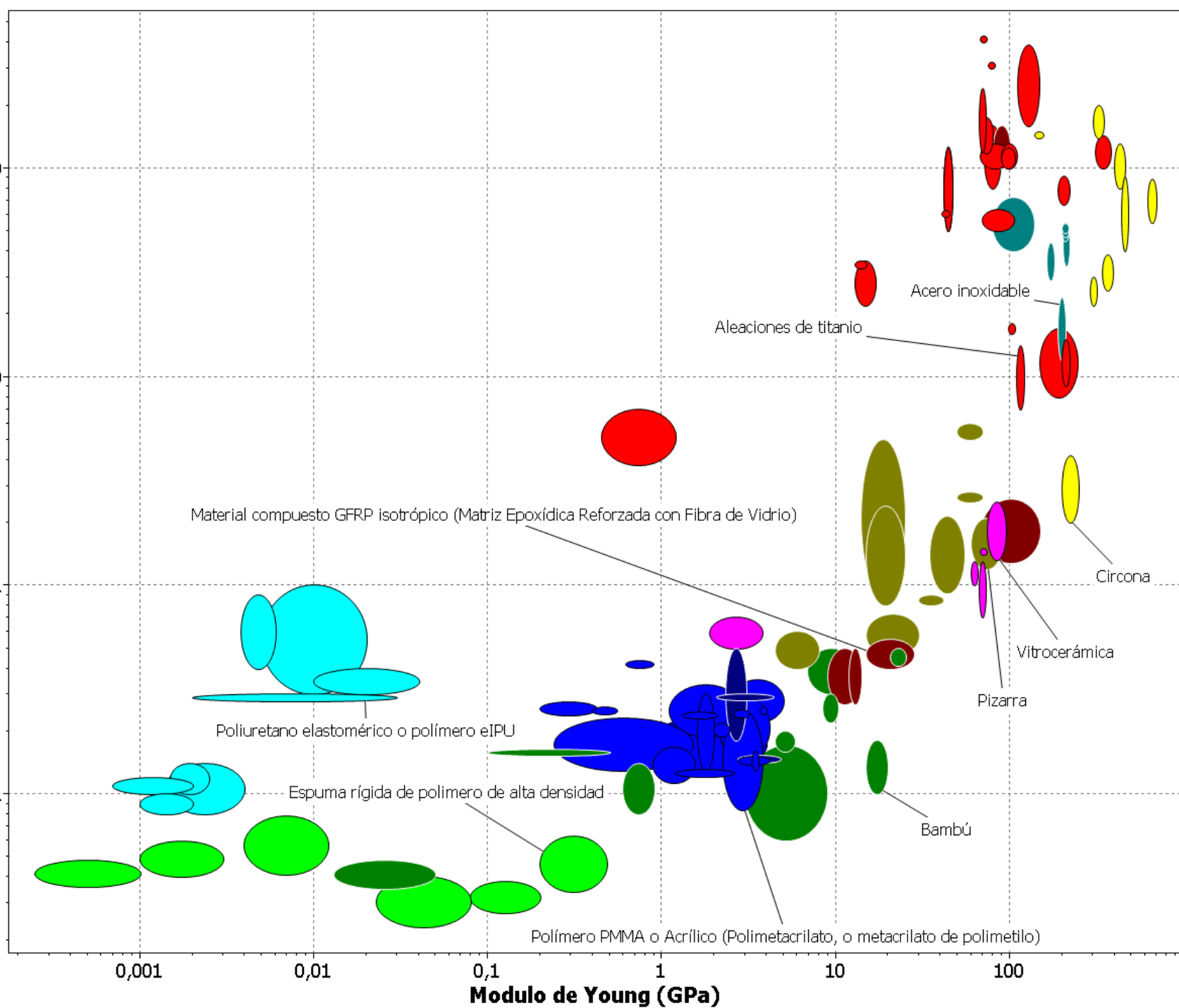
Acero inoxidable

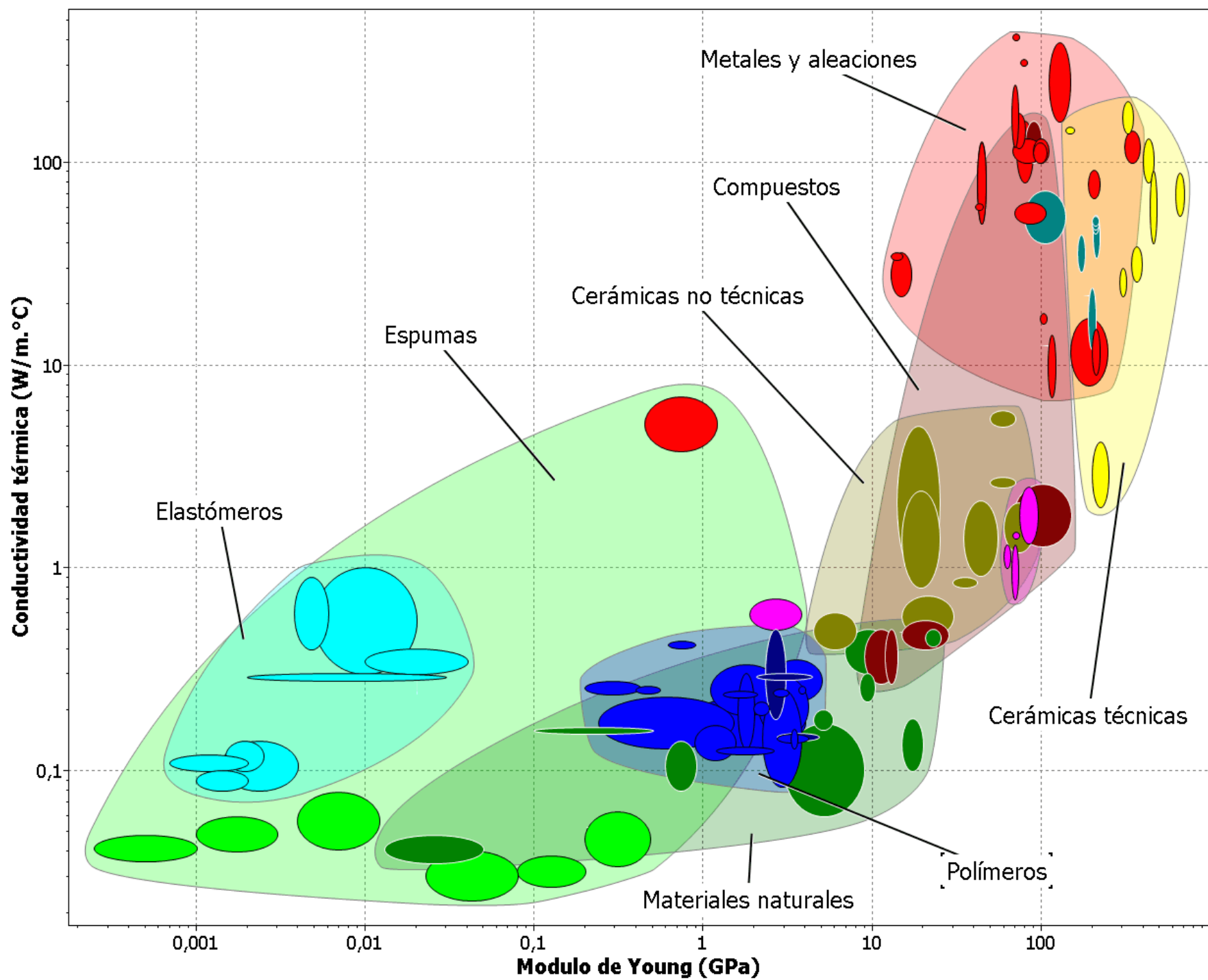
Circona

Vitrocerámica

Pizarra

Bambú







Precio (EUR/kg)

10000

1000

100

10

1

0,1

0,001

0,01

0,1

1

10

100

Modulo de Young (GPa)

Goma o caucho SBR (copolímero de estireno y butadieno)

Polímero PVC o cloruro de polivinilo (tpPVC: termoplástico)

Madera dura: roble, respuesta en dirección paralela a las vetas

Material compuesto DMC, palanquillas de fibras en matriz de poliéster

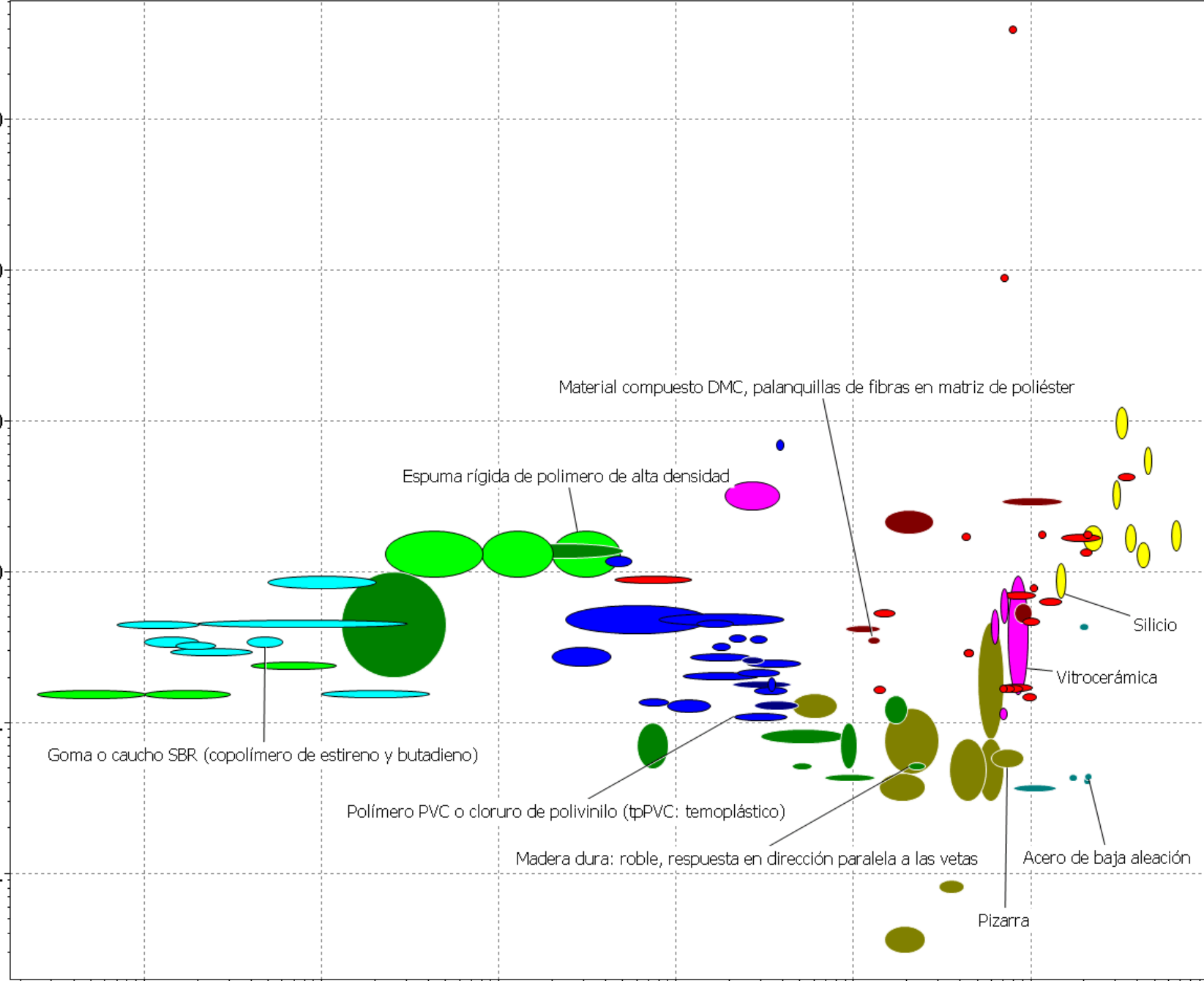
Espuma rígida de polímero de alta densidad

Silicio

Vitrocerámica

Acero de baja aleación

Pizarra



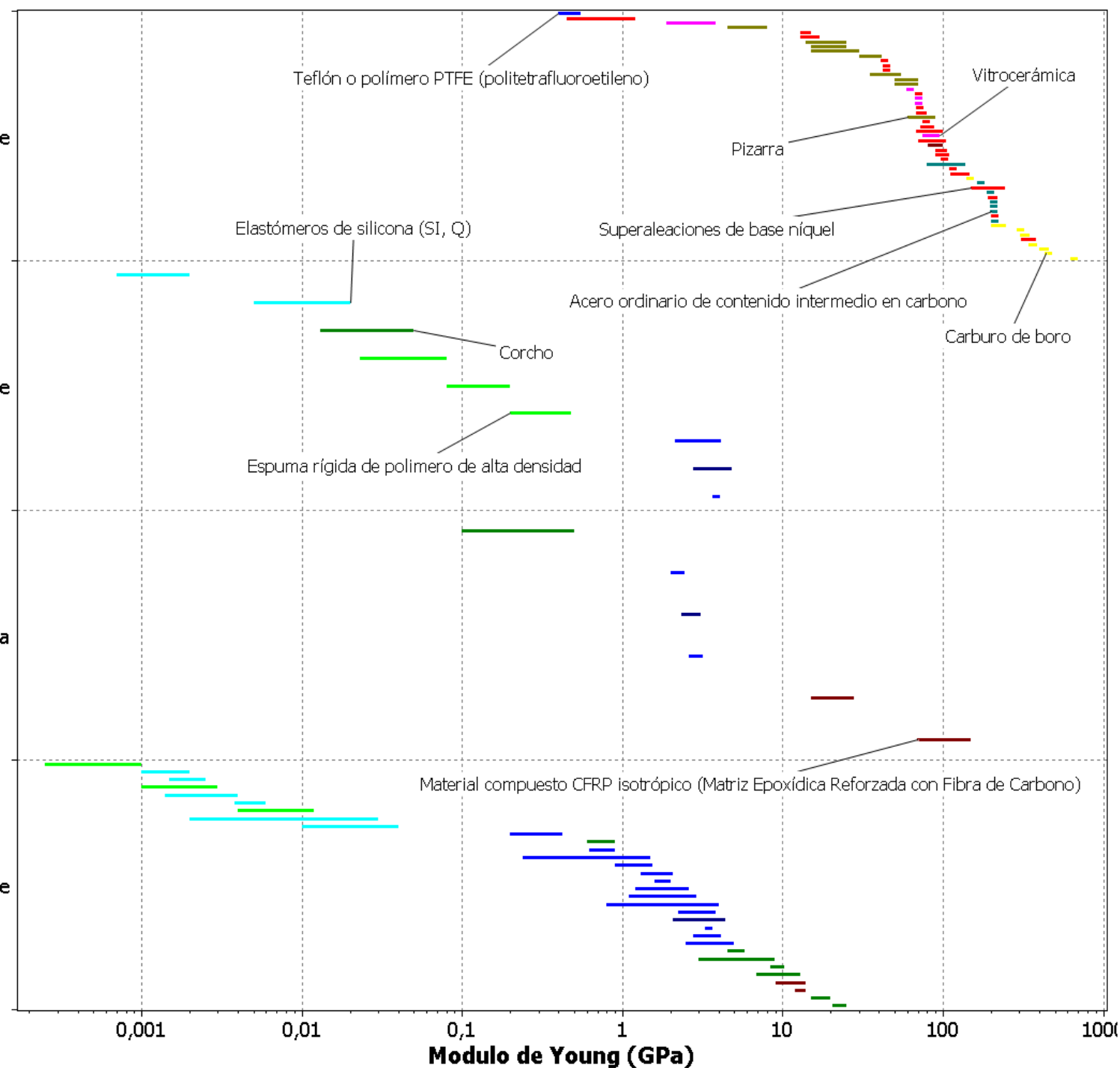
Inflamabilidad

Altamente inflamable

Combustión lenta

Auto extingüible

No inflamable



**Ratio de toxicidad**

No toxico

Ligeramente toxico

Toxico

Muy toxico

0,001

0,01

0,1

1

10

100

1000

**Modulo de Young (GPa)**

Elastómeros de silicona (SI, Q)

Espuma rígida de polimero de alta densidad

Polímero PET (Tereftalato de polietileno)

Acero ordinario de contenido intermedio en carbono

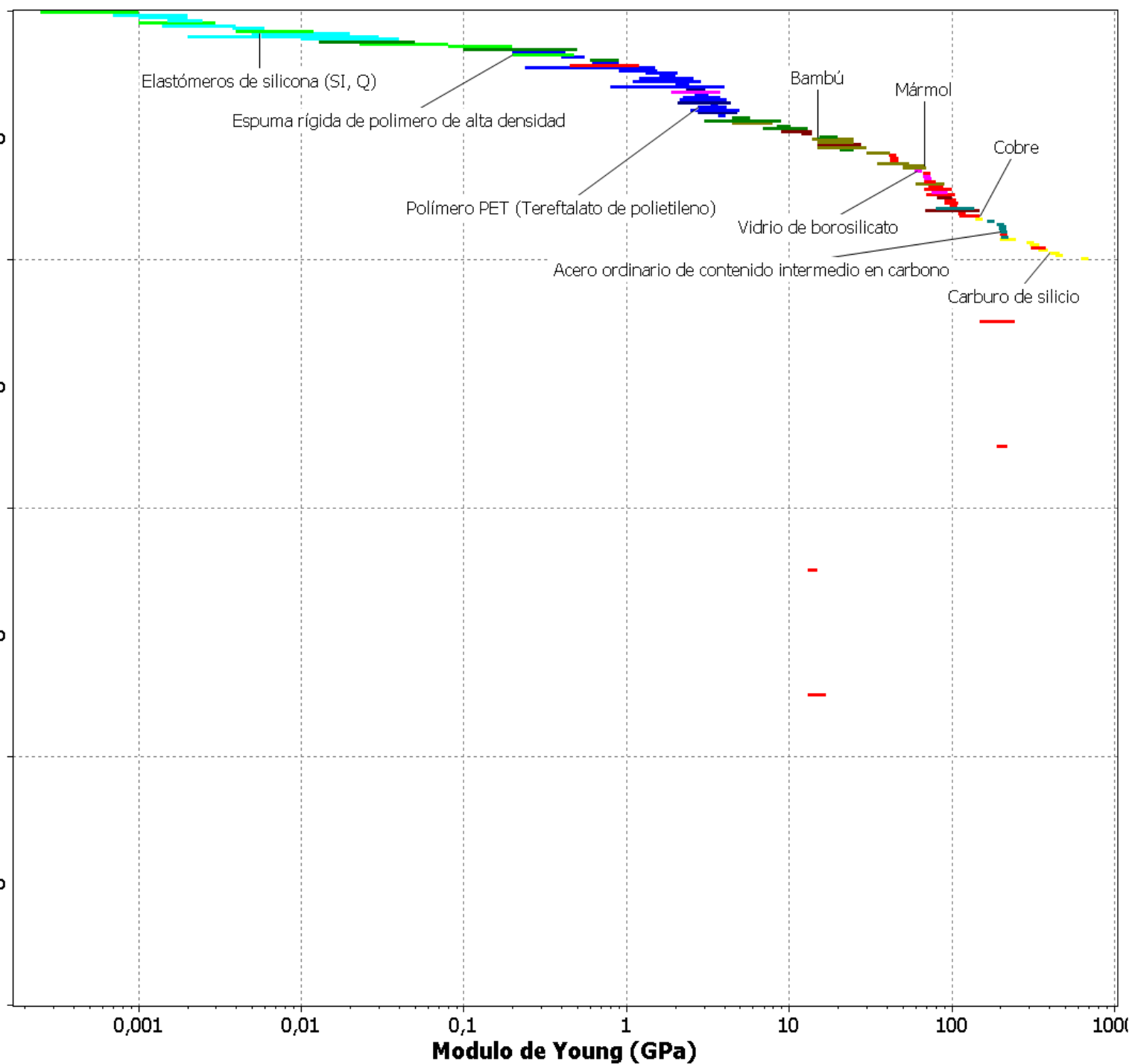
Bambú

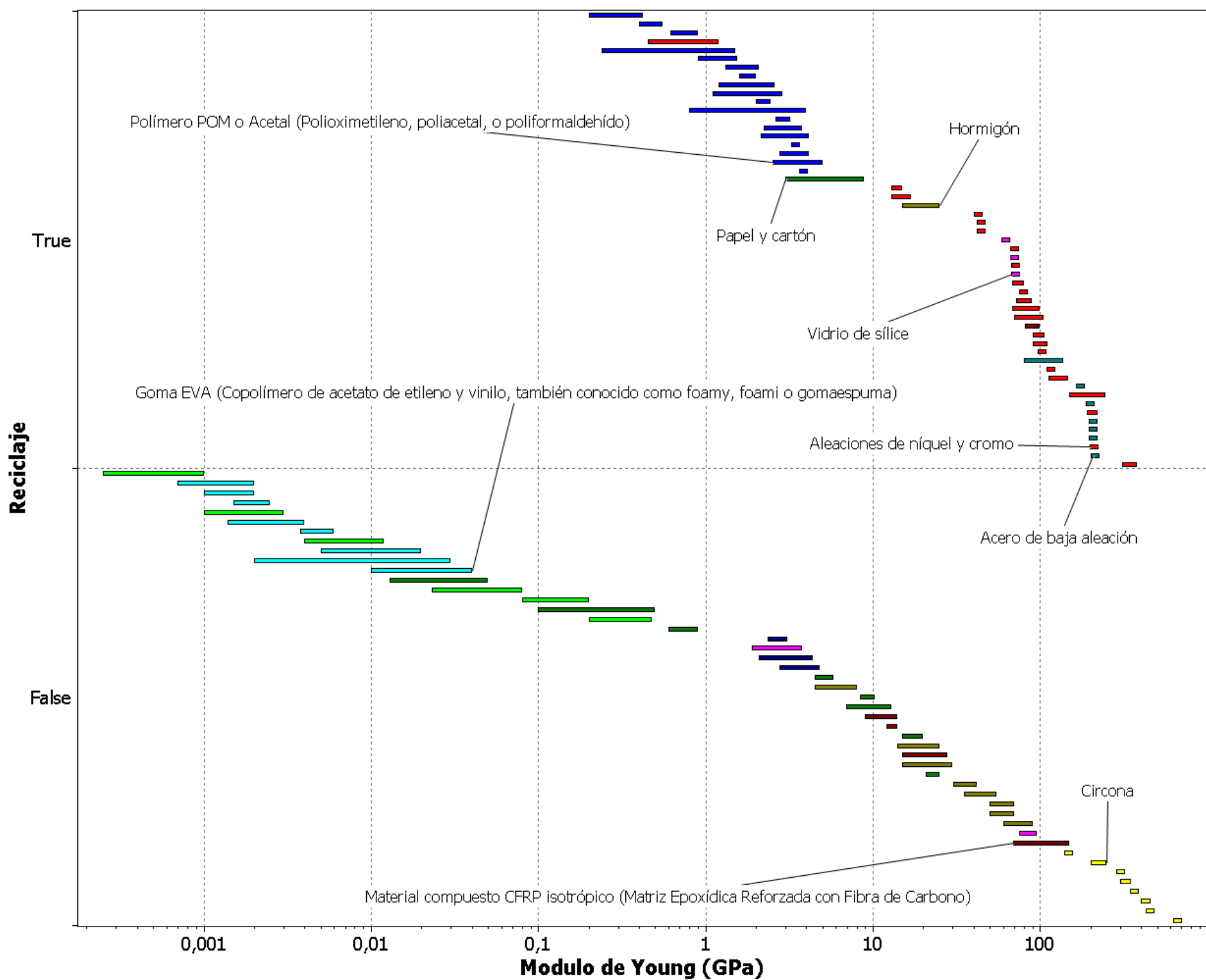
Mármol

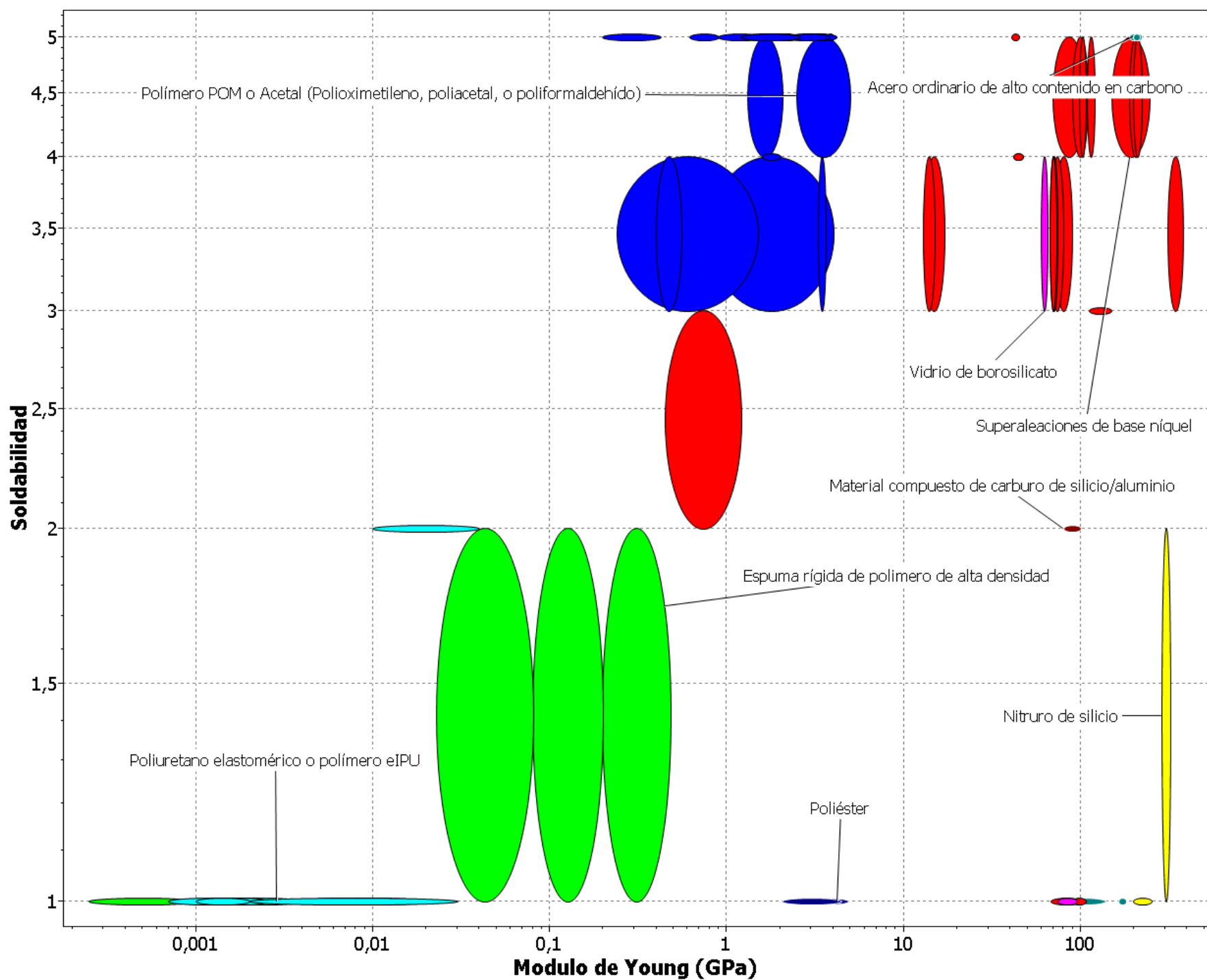
Cobre

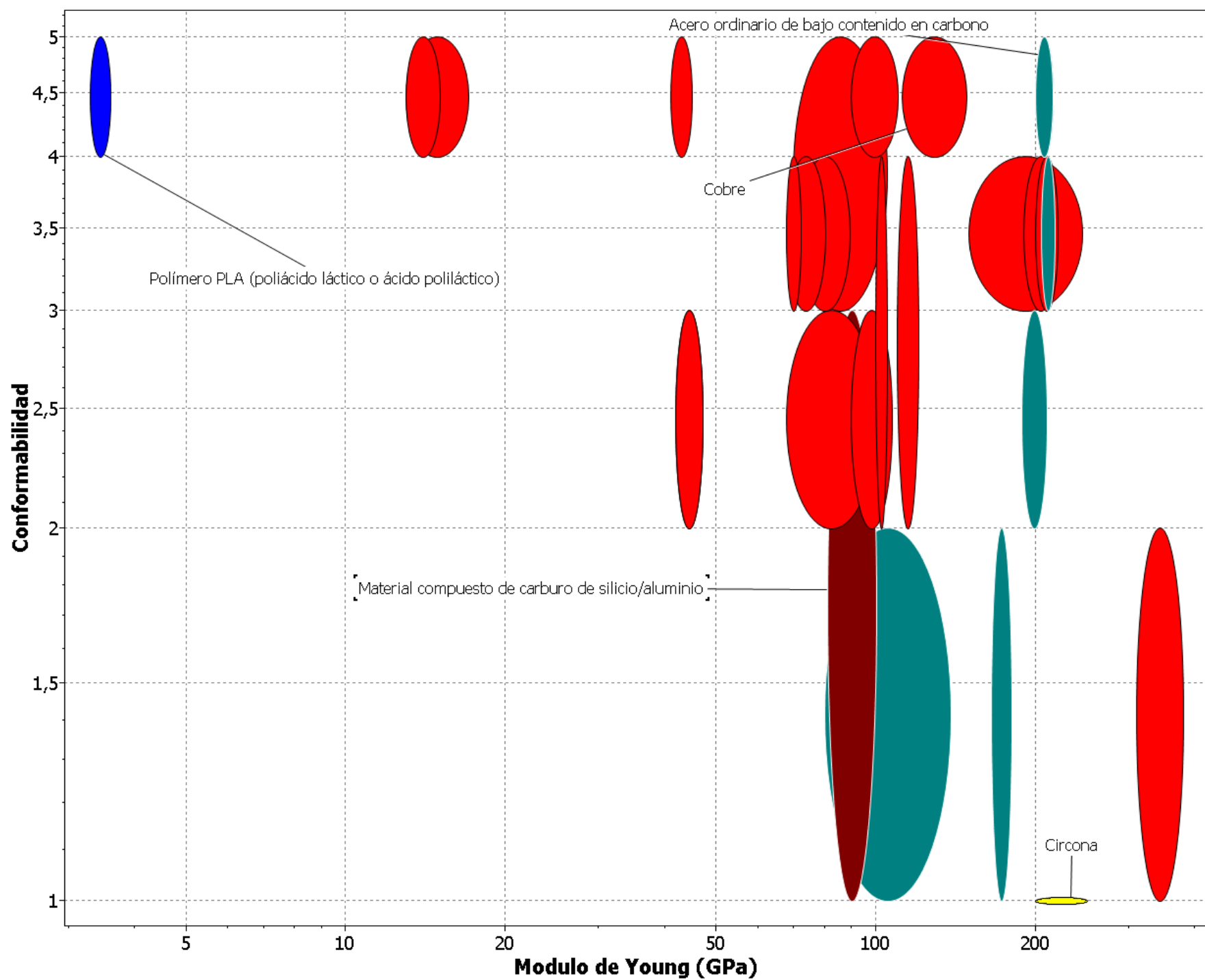
Vidrio de borosilicato

Carburo de silicio

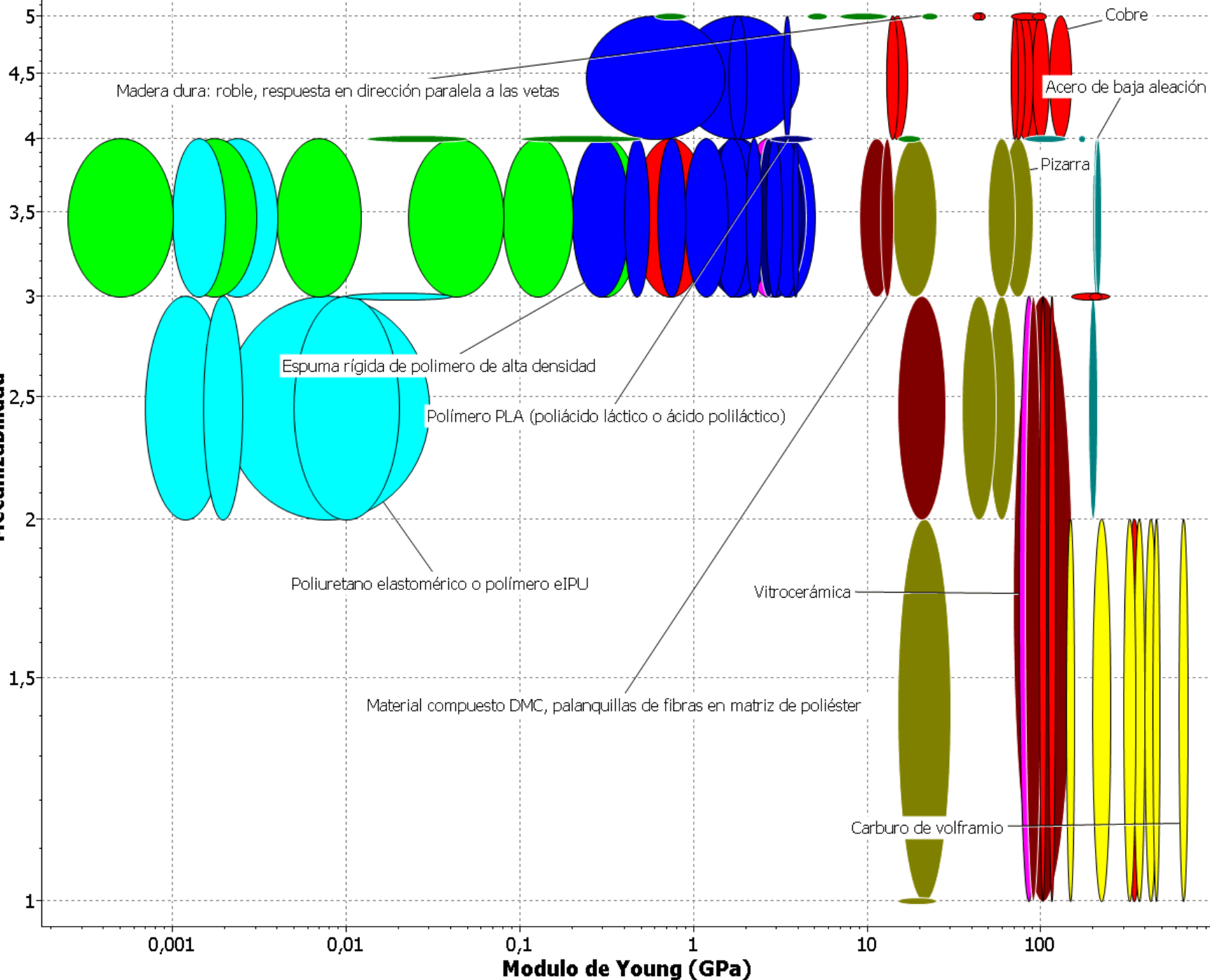


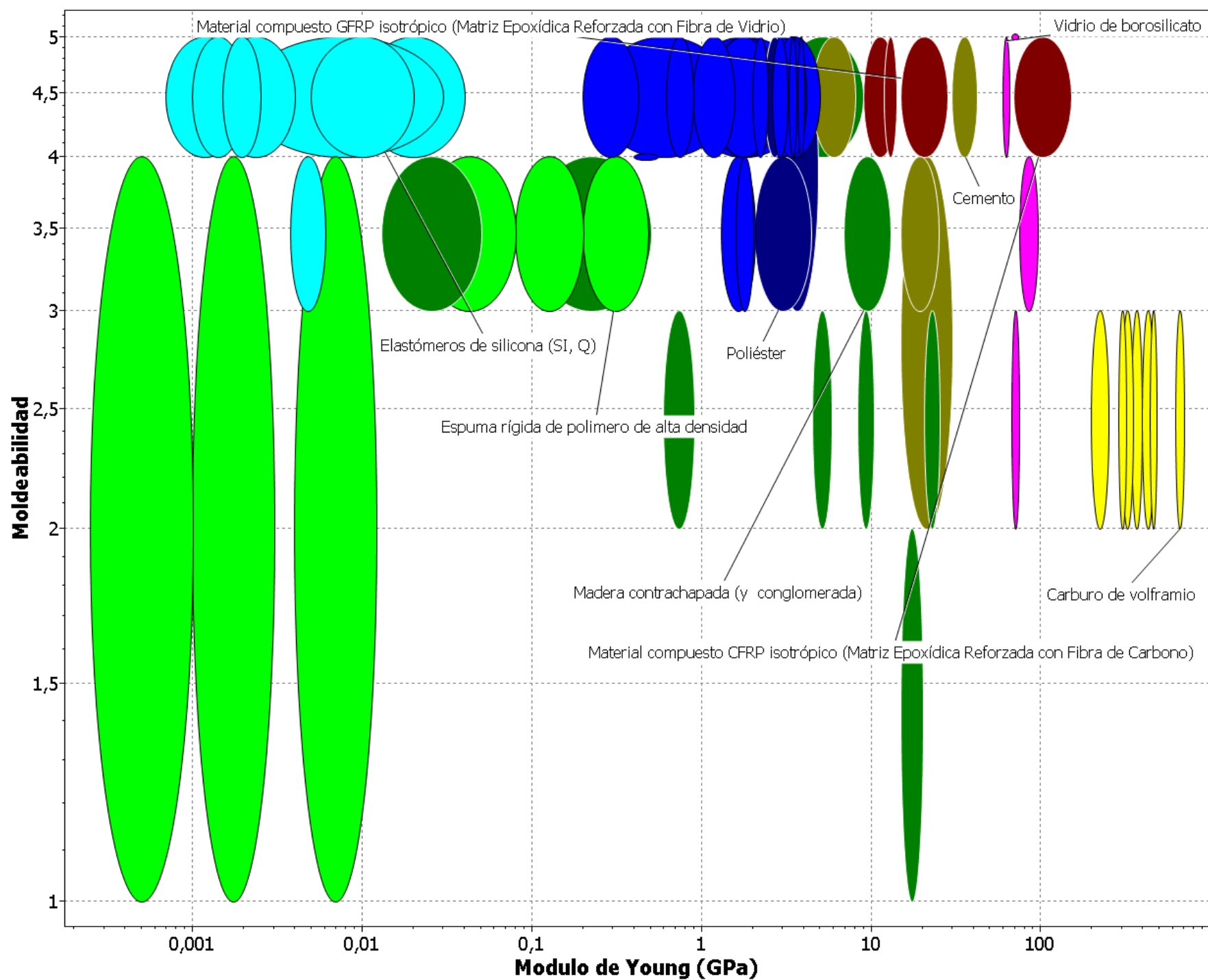






Mecanizabilidad







Ácido clorhídrico (36%)

Excelente

Aceptable

Uso limitado

Inaceptable

Polímero PVC o cloruro de polivinilo (tpPVC: termoplástico)

Material compuesto DMC, palanquillas de fibras en matriz de poliéster

Pizarra

Vitrocerámica

Superalaciones de base níquel

Carburo de wolframio

Espuma rígida de polímero de alta densidad

Bambú

Acero inoxidable

0,001

0,01

0,1

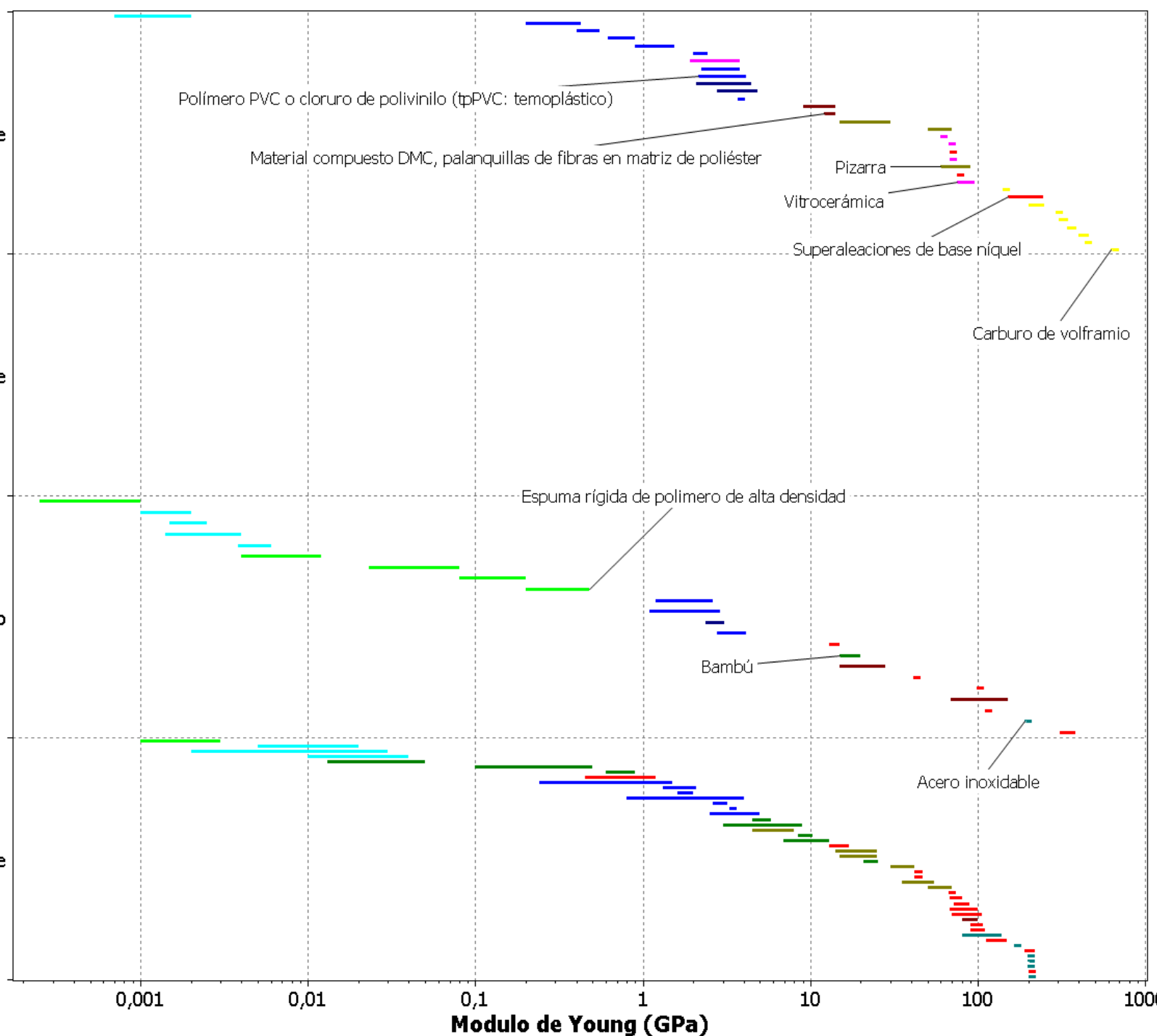
1

10

100

1000

Modulo de Young (GPa)



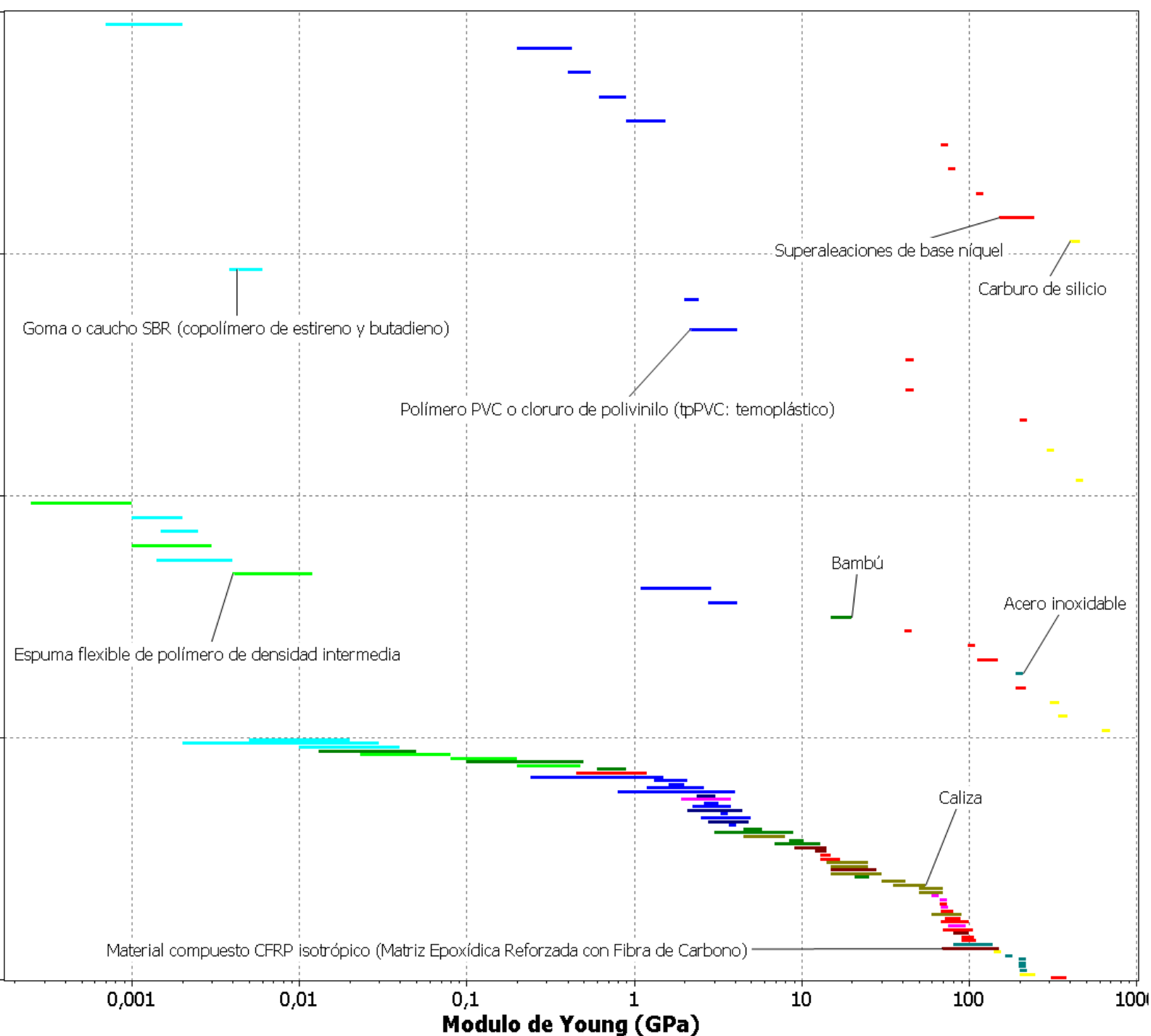
Ácido fluorhídrico (40%)

Excelente

Aceptable

Uso limitado

Inaceptable



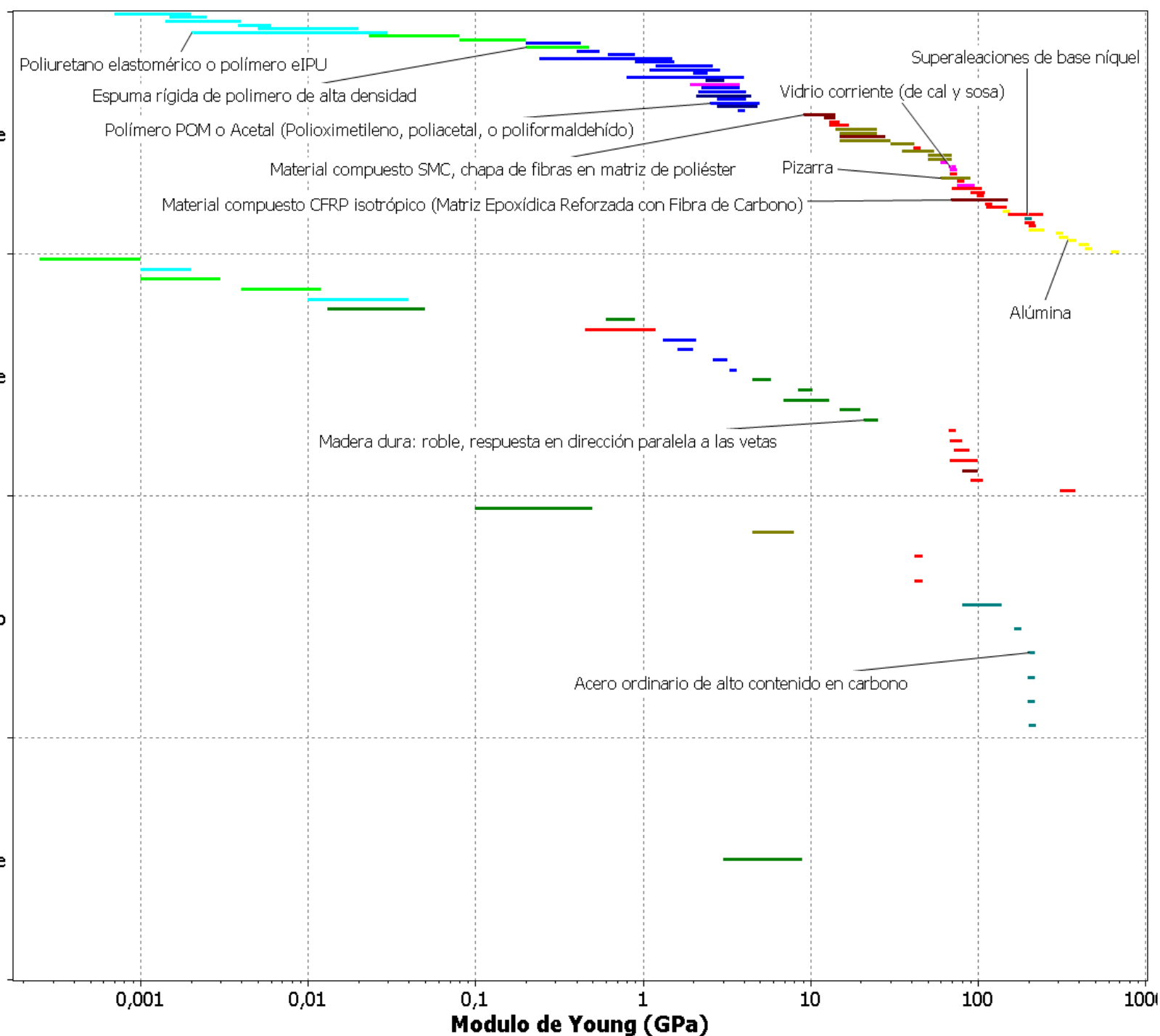
Agua salada

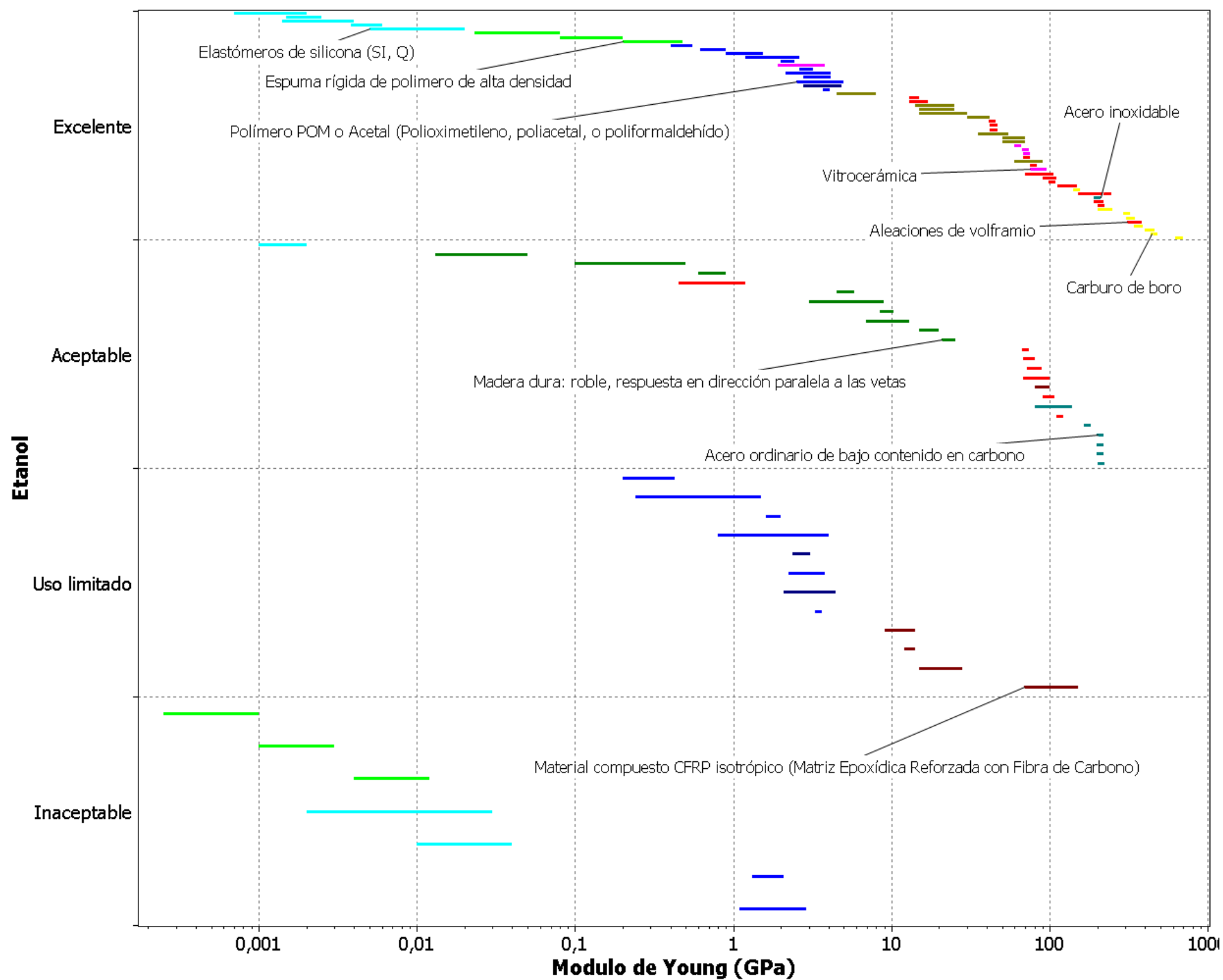
Excelente

Aceptable

Uso limitado

Inaceptable





Hidróxido de sodio (60%)

Excelente

Aceptable

Uso limitado

Inaceptable

Elastómeros de silicona (SI, Q)

Espuma rígida de polímero de alta densidad

Polímero POM o Acetal (Polioximetileno, poliacetil, o poliformaldehído)

Vitrocerámica

Cobre

Pizarra

Nitrato de silicio

Acero ordinario de contenido intermedio en carbono

Material compuesto GFRP isotrópico (Matriz Epoxídica Reforzada con Fibra de Vidrio)

0,001

0,01

0,1

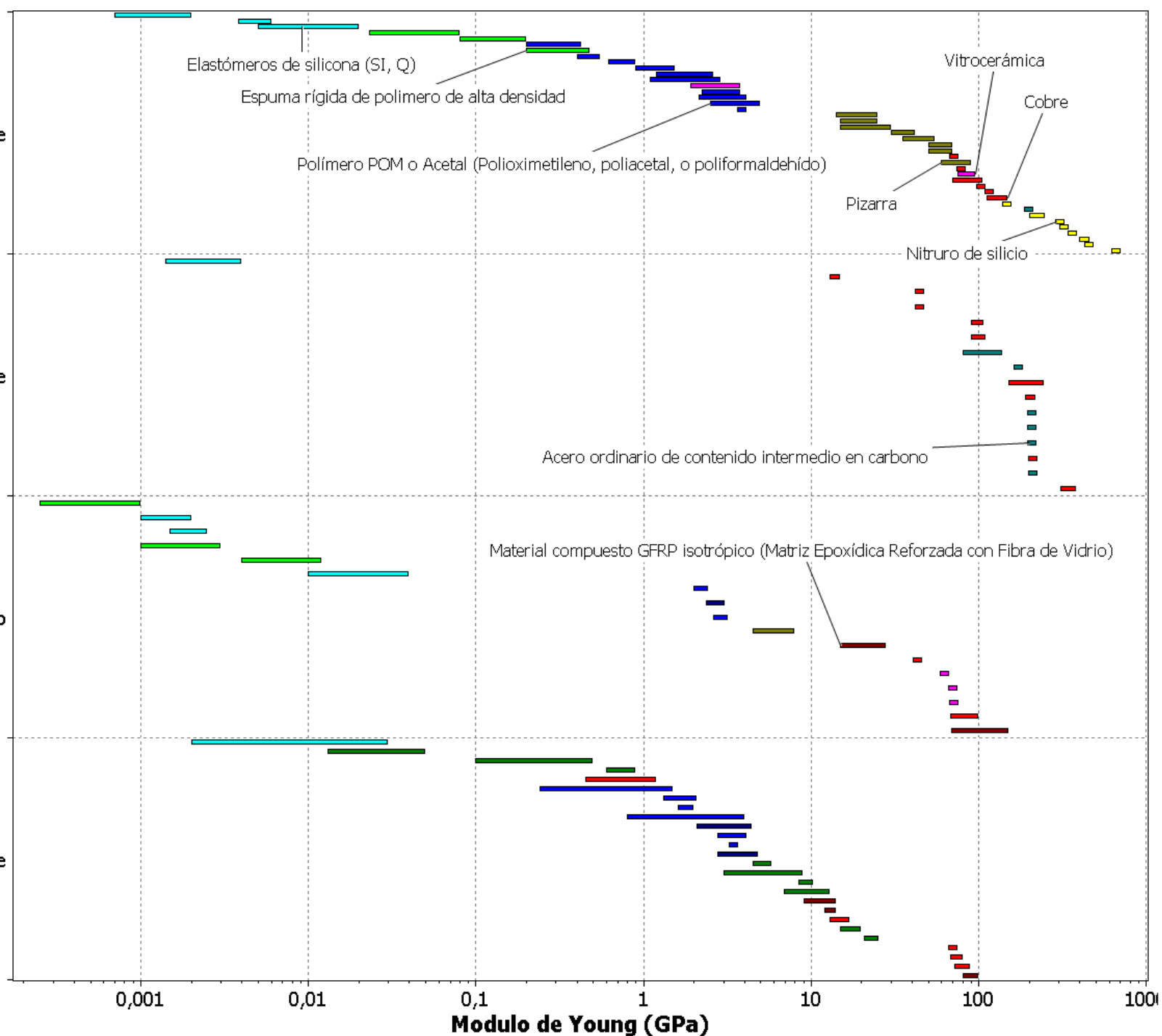
1

10

100

1000

Modulo de Young (GPa)

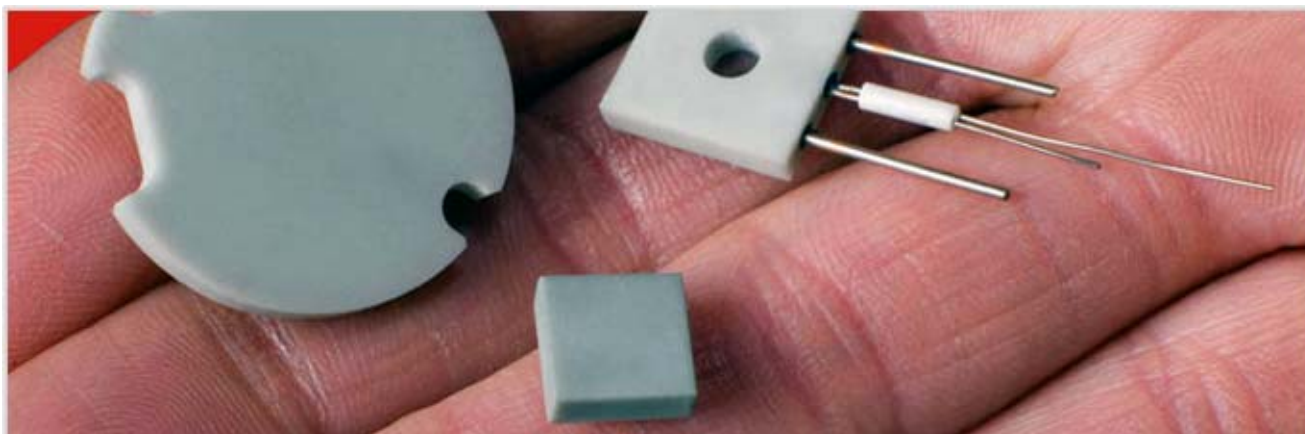


Ejemplo de información estructurada disponible en CES EduPack

Nitruro de aluminio

## Descripción

### Figura



### Leyenda

Piezas en nitruro de aluminio (Ceram Research Ltd.). © Watlow Electric Manufacturing Company 2013

### Material

El nitruro de aluminio (AlN) tiene una inusual combinación de propiedades: es aislante eléctrico, y excelente conductor del calor. Esto es justo lo que se requiere para sustratos en electrónica de alta potencia, el sustrato debe aislar evacuando el calor de los microchips. Esto, unido a su alta resistencia, estabilidad química y baja expansión lineal, le dan un papel preponderante como disipadores de calor para la electrónica de potencia. Es transparente a las microondas y a la radiofrecuencia, y por lo tanto se utiliza para fabricar ventanas de microondas.

### Composición (resumen)

AlN

### Propiedades generales

Densidad	3,26e3	-	3,33e3	kg/m <sup>3</sup>
Precio	* 77,6	-	124	EUR/kg
Fecha de primer uso ("-" significa AC)	1984			

### Propiedades mecánicas

Modulo de Young	302	-	348	GPa
Modulo a cortante	126	-	139	GPa
Módulo en volumen	* 200	-	232	GPa
Coefficiente de Poisson	0,23	-	0,26	
Límite elástico	* 300	-	350	MPa
Resistencia a tracción	* 300	-	350	MPa
Resistencia a compresión	1,97e3	-	2,5e3	MPa
Elongación	0			% strain
Dureza-Vickers	990	-	1,26e3	HV
Resistencia a fatiga para 10 ^ 7 ciclos	* 168	-	248	MPa
Tenacidad a fractura	2,5	-	3,4	MPa.m <sup>0.5</sup>
Coefficiente de pérdida mecánica (tan delta)	* 1e-5	-	3e-5	

### Propiedades térmicas

Punto de fusión	2,4e3	-	2,51e3	°C
Máxima temperatura en servicio	* 1,03e3	-	1,73e3	°C
Mínima temperatura en servicio	273			°C
¿Conductor térmico o aislante?	Buen conductor			
Conductividad térmica	140	-	200	W/m.°C
Calor específico	780	-	820	J/kg.°C
Coefficiente de expansión térmica	4,9	-	5,5	µstrain/°C

### Propiedades eléctricas

¿Conductor eléctrico o aislante?	Buen aislante
----------------------------------	---------------

Values marked \* are estimates.

No se ofrece garantía en la precisión de los datos proporcionados

Resistividad eléctrica	1e19	-	1e21	μohm.cm
Constante dieléctrica (permisividad relativa)	8,3	-	9,3	
Factor de disipación (tangente de pérdida dieléctrica)	5e-4	-	9,2e-4	
Rigidez dieléctrica (colapso dieléctrico)	17	-	20	1000000 V/m

## Propiedades ópticas

Transparencia	Opaco
---------------	-------

## Procesabilidad

Moldeabilidad	2	-	3
Mecanizabilidad	1	-	2

## Durabilidad: Agua y disoluciones acuosas

Agua dulce	Excelente
Agua salada	Excelente
Suelos ácidos (turba)	Excelente
Suelos alcalinos (arcilla)	Excelente
Vino	Excelente

## Durabilidad: ácidos

Ácido acético (10%)	Excelente
Ácido acético (glacial)	Excelente
Ácido cítrico (10%)	Excelente
Ácido clorhídrico (10%)	Excelente
Ácido clorhídrico (36%)	Excelente
Ácido fluorhídrico (40%)	Uso limitado
Ácido nítrico (10%)	Excelente
Ácido nítrico (70%)	Excelente
Ácido fosfórico (10%)	Excelente
Ácido fosfórico (85%)	Excelente
Ácido sulfúrico (10%)	Excelente
Ácido sulfúrico (70%)	Excelente

## Durabilidad: bases

Hidróxido de sodio (10%)	Excelente
Hidróxido de sodio (60%)	Excelente

## Durabilidad: gasolinas, aceites y solventes

Acetato de amilo	Excelente
Benceno	Excelente
Tetracloruro de carbono	Excelente
Cloroformo	Excelente
Crudo	Excelente
Diesel	Excelente
Lubricantes	Excelente
Parafinas, keroseno	Excelente
Petróleo (gasolina)	Excelente
Siliconas líquidas	Excelente
Toluenos	Excelente
Terpenos	Excelente
Aceites vegetales (general)	Excelente
Bebidas alcohólicas (blancas)	Excelente

## Durabilidad : alcohol, aldehídos, cetonas

Acetaldehídos	Excelente
Acetona	Excelente
Etanol	Excelente
Etilenglicol	Excelente
Formaldehído	Excelente
Glicerol	Excelente



Metanol	Excelente
---------	-----------

**Durabilidad: halógenos y gases**

Cloro seco (gas)	Excelente
Fluor (gas)	Aceptable
O2 (oxígeno gas)	Excelente
Dióxido de azufre (gas)	Excelente

**Durabilidad: entornos construidos**

Atmósfera industrial	Excelente
Atmósfera rural	Excelente
Atmósfera marina	Excelente
Radiación UV (luz solar)	Excelente

**Durabilidad: Inflamabilidad**

Inflamabilidad	No inflamable
----------------	---------------

**Durabilidad: ambiente térmico**

Tolerancia a temperaturas criogénicas	Excelente
Tolerancia por encima de 150°C (302 F)	Excelente
Tolerancia por encima de 250°C (482 F)	Excelente
Tolerancia por encima de 450°C (842 F)	Excelente
Tolerancia por encima de 850°C (1562 F)	Excelente
Tolerancia a mas de 850°C (1562 F)	Excelente

**Producción de materia prima: CO2, energía y agua**

Contenido en energía, producción primaria	* 221	-	244	MJ/kg
Huella de CO2, producción primaria	* 11,9	-	13,2	kg/kg
Agua consumida	* 232	-	256	l/kg

**Procesado de material: energía**

Energía de lijado (p/u peso eliminado)	* 133	-	147	MJ/kg
----------------------------------------	-------	---	-----	-------

**Procesado de material: huella de CO2**

CO2 en lijado (p/u peso eliminado)	* 9,95	-	11	kg/kg
------------------------------------	--------	---	----	-------

**Reciclado del material: energía, CO2 y fracción reciclable**

Reciclaje	✗			
Fracción reciclable en suministro habitual	0,5	-	1	%
Reciclado inferior	✓			
Combustión para recuperar energía	✗			
Vertedero	✓			
Biodegradable	✗			
Ratio de toxicidad	No toxico			
Fuente renovable	✗			

**Aspectos medio ambientales**

Las cerámicas técnicas utilizadas en estado puro, como es el caso del AlN, son muy intensivas en consumo energético.

**Información de apoyo**

Líneas de diseño

El nitruro de aluminio es particularmente inusual debido a su alta conductividad térmica (entre la cerámica solo el óxido de berilio, y el diamante tienen valores más altos). Combinada con una resistencia eléctrica alta, baja constante dieléctrica, resistencia a la corrosión y al choque térmico. Es resistente al ataque de los metales fundidos, pero se hidroliza lentamente con el agua. La cerámica técnica está conformada por los siguientes pasos: (A) prensado, extrusión, prensado isoestático (para barras y tubos), o moldeo por inyección (para piezas intrincadas, con alto volumen de producción). (B) mecanizado en verde antes de la cocción, utilizando herramientas estándar. (C) cocción o "sinterización" típicamente entre 1550 a 1700°C durante un tiempo entre 12 y 20 horas, la pieza se reduce en un 20%. (D) se pule con diamante para alcanzar tolerancias más estrictas y acabados de la superficie de +/- 10 micras es factible. El costo de una pieza de cerámica es mucho mayor si tiene que ser pulida con diamante. Así, el diseño de la sinterización de la forma neta, eliminando la etapa (D) es altamente deseable. La tolerancia como norma para las dimensiones cocidas es de +/- 1% ó 125 micras, la que sea mayor.

## Aspectos técnicos

El nitruro de aluminio es difícil de sinterizar en estado puro. Para permitir su sinterización entre 1600 y 1900°C, es necesaria la adición de CaO o Y<sub>2</sub>O<sub>3</sub>.

## Usos típicos

Ventanas para microondas, camisas aislantes de conectores y electrodos en bujías, sustratos y encapsulados de componentes en microelectrónica de semiconductores, ventanas, calefactores, anillos de cierre especial en abrazaderas, y placas de distribución de gases

## Links

Universo Procesos

Fabricantes

Referencias

# Referencias

- “Materials Selection in Mechanical Design” by M.F. Ashby, Ed. Elsevier
- New approaches to Materials Education (course authored by Mike Ashby and Dave Cebon Cambridge, UK)
- The Cambridge Material Selector(*CES 4*) *software -Granta Design, Cambridge* (*[www.grantadesign.com](http://www.grantadesign.com)*)